

Appendix A. ユーザが直接使わない下位ルーチンの説明

§3 で説明した各ルーチンの下位ルーチンとして、次のようなものがある。

A.1 小規模行列用ルーチンの下位ルーチン (1.3 節のフローチャートを参照)

A.1.1 CRESZ の下位ルーチン

CRESZ の下位ルーチンとして、PRMCHK (A.5 節を参照) の他に下記のルーチン CRENUM, CRESTA, CRBASE がある。以下での説明は、2.1 節の議論を参照しながら読んでいただきたい。

[1] スピン配列のグループ分けのための準備

CALL CRENUM(NS, NSLMAX, NSB, ITSZ, NH, NL)

NSB, NH, NL の計算を行う。

[引数]

すべて CRESZ でのものと同じ。

[2] スピン配列のグループ分けと Storage Table, Lookup Table の作成

CALL CRESTA(NS, NSLMAX, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2)

NSTAT, ISTAT1, ISTAT2 の計算を行う。

[引数]

すべて CRESZ でのものと同じ。

[3] 各グループに属するスピン配列の内の最初のものの番号の計算

CALL CRBASE(NSB, NSLMAX, NH, NL, IBASE, NSTAT)

IBASE の計算を行う。

[引数]

すべて CRESZ でのものと同じ。

A.1.2 SMALL の下位ルーチン

SMALL の下位ルーチンとして、A.1.3 節の CRELMS の他に下記のルーチン DCSMSN, DCSMSS, DIAGNLZ がある。

[1] ACOS および SX 用の版でのエネルギー固有値, 固有ベクトルの計算

CALL DCSMSN(ELMNT, IDCLR, IDIM, EPS, EIGN, NE, ISW, VEC, IERR)

CALL DCSMSS(ELMNT, IDCLR, IDIM, EPS, EIGN, NVEC,
VECS, IDCLR, ISW, IWK, VEC, IERR)

DCSMSS は EIGN の計算を行い, DCSMSS は $NVEC \geq 1$ の場合に引用されて, EIGN および VECS の計算を行う。前述の通り, DCSMSN, DCSMSS は科学技術計算ライブラリ ASL 中のサブルーチン副プログラムである。以下での引数の説明は, 1.5 節に与えた DCSMSN, DCSMSS の説明を参照しながら読んでいただきたい。

[引数]

EIGN, NVEC, VECS, IWK, NE は SMALL でのものと同じ。

ELMNT(IDCLR, IDIM) (入力; 8 バイト実数)

CRELMS で計算された行列要素 $ELMNT(J', J)$ の値が $ELMNT(J'+1, J+1)$ に与えられる。ここで, $J, J' = 0, 1, \dots, IDIM-1$ 。DCSMSS, DCSMSN の実行の後, ELMNT の内容は保存されない。

IDCLR (入力; 4 バイト整数)

SMALL での NDCLRS に 1 を加えた値が与えられる。

IDIM (入力; 4 バイト整数)

SMALL での IBASE(NSB) が与えられる。 $2 \leq IDIM$ でなければならない。

EPS (入力; 8 バイト実数)

-1.0^{-13} が与えられる。

ISW (入力; 4 バイト整数)

-1 が与えられる。

DCSMSS においては **VEC(5*IDIM)** (作業領域; 8 バイト実数)

DCSMSS においては **VEC(8*IDIM)** (作業領域; 8 バイト実数)

VEC は作業領域として使用されており, SMALL, 従ってユーザが作るメインプログラムにおいて, ここで示した領域が確保されていなければならない。

IERR (出力; 4 バイト整数)

正常終了の場合 0 が返される。異常終了の場合に返される IERR の値の詳細については, 日本電気株式会社発行のマニュアル⁹⁾を参照されたい。

[2] SUN 用の版でのエネルギー固有値, 固有ベクトルの計算

CALL DIAGNLZ(ELMNT, IDCLR, IDIM, EIGN, VECS, NE, NVEC, EPS, VEC, IWK)

EIGN および VECS の計算を行う。

[引数]

EIGN, VECS, NE, NVEC, IWK は SMALL でのものと同じ。

ELMNT(IDCLR, IDIM) (入力; 8 バイト実数)

CRELMS で計算された行列要素 $ELMNT(J', J)$ の値が $ELMNT(J'+1, J+1)$ に与えられる。ここで, $J, J'=0, 1, \dots, IDIM-1$. DIAGNLZ の実行の後, ELMNT の内容は保存されない。

IDCLR (入力; 4 バイト整数)

SMALL での NDCLRS に 1 を加えた値が与えられる。

IDIM (入力; 4 バイト整数)

SMALL での LBASE(NSB) が与えられる。 $3 \leq IDIM \leq 2000$ でなければならない。

EPS (入力; 8 バイト実数)

1.0^{-13} が与えられる。

VEC(IDIM, 8) (作業領域; 8 バイト実数)

VEC は作業領域として使用されており, SMALL, 従ってユーザが作るメインプログラムにおいて, ここで示した領域が確保されていなければならない(ただし, エネルギー固有値のみを求めるときには, 確保される領域は $6*IDIM$ 以上であればよい)。

DIAGNLZ の下位ルーチンとして, 下記のルーチン HSHLDR, BISEC, VEC3 がある。

**CALL HSHLDR(ELMNT, IDCLR, IDIM, WK(1, 1), WK(1, 2), WK(1, 3),
WK(1, 4), WK(1, 5), WK(1, 6))**

CALL BISEC(WK(1, 1), WK(1, 2), IDIM, E, NE, EPS)

**CALL VEC3(E, ELMNT, IDCLR, IDIM, NE, NVEC, WK(1, 4), WK(1, 5),
WK(1, 6), WK(1, 7), WK(1, 8), IWK, WK(1, 1), WK(1, 2), WK(1, 3), V)**

HSHLDR, BISEC, VEC3 の 3 つのルーチンは TITPACK Version 2 でのものをそのまま使わせていただいている。それらの詳細については, TITPACK Version 2 の操作説明書³⁾を参照されたい。

A.1.3 CRELMS の下位ルーチン

CRELMS の下位ルーチンとして, PAIRCHK (A.5 節を参照) の他に下記のルーチン ELMSDIA, ELMSOFD がある.

[1] 対角行列要素の計算

```
CALL ELMSDIA(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,  
             ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND,  
             ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, ELMNT, NDCLRS)
```

ELMNT(J, J) の計算を行う.

[引数]

ELMNT 以外は CRELMS でのものと同じ.

ELMNT(0:NDCLRS, 0:NDCLRS) (出力; 8 バイト実数)

対角行列要素 $\langle \Phi(J) | \mathcal{H}_d | \Phi(J) \rangle$ が ELMNT(J, J) に返される (2.2 節および 2.2.1 節を参照). ここで, $J=0, 1, \dots, \text{IBASE}(\text{NSB})-1$.

ELMSDIA の下位ルーチンとして, 下記のルーチン ELMSDA, ELMSDIBX がある.

```
CALL ELMSDA(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,  
            ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND,  
            ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, ELMNT, NDCLRS)
```

[引数]

ELMNT 以外は ELMSDIA でのものと同じ.

ELMNT(0:NDCLRS, 0:NDCLRS) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた ELMNT(J, J) に $\langle \Phi(J) | \sum_{\ell} h_d(\ell) | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が ELMNT(J, J) に返される (2.2 節および 2.2.1 節を参照). ここで, $J=0, 1, \dots, \text{IBASE}(\text{NSB})-1$.

```
CALL ELMSDBX(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,  
             ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND,  
             ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, ELMNT, NDCLRS)
```

[引数]

ELMNT 以外は ELMSDIA でのものと同じ.

ELMNT(0:NDCLRS, 0:NDCLRS) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた ELMNT(J, J) に $\langle \Phi(J) | \sum_{\langle \ell, \ell' \rangle} h_d(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が ELMNT(J, J) に返される (2.2 節および 2.2.1 節を参照). ここで, $J=0, 1, \dots, \text{IBASE}(\text{NSB})-1$.

[2] 非対角行列要素の計算

CALL ELMSOFD(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ELMNT, NDCLRS)

ELMNT(J', J) ($J' \neq J$) の計算を行う。

[引数]

ELMNT 以外は CRELMS でのものと同じ。

ELMNT(0:NDCLRS, 0:NDCLRS) (出力; 8 バイト実数)

非行列要素 $\langle \Phi(J') | \mathcal{H}_o + \mathcal{H}_o^\dagger | \Phi(J) \rangle$ が ELMNT(J', J) に返される (2.2 節および 2.2.1 節を参照)。ここで、 $J' \neq J$ かつ $J, J' = 0, 1, \dots, \text{IBASE}(\text{NSB}) - 1$ 。

ELMSOFD の下位ルーチンとして、下記のルーチン ELMSLLBX, ELMSLHBX, ELMSHHBX がある。これらの引数の説明は、2.2 節 および 2.2.1 節の議論を参照しながら読んでいただきたい。

CALL ELMSLLBX(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ELMNT, NDCLRS)

[引数]

ELMNT 以外は ELMSOFD でのものと同じ。

ELMNT(0:NDCLRS, 0:NDCLRS) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた ELMNT(J', J) に $\langle \Phi(J') | \mathcal{H}_{o,LL} + \mathcal{H}_{o,LL}^\dagger | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が ELMNT(J', J) に返される。ここで、 $J' \neq J$ かつ $J, J' = 0, 1, \dots, \text{IBASE}(\text{NSB}) - 1$ 。

CALL ELMSLHBX(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ELMNT, NDCLRS)

[引数]

ELMNT 以外は ELMSOFD でのものと同じ。

ELMNT(0:NDCLRS, 0:NDCLRS) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた ELMNT(J', J) に $\langle \Phi(J') | \mathcal{H}_{o,LH} + \mathcal{H}_{o,LH}^\dagger | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が ELMNT(J', J) に返される。ここで、 $J' \neq J$ かつ $J, J' = 0, 1, \dots, \text{IBASE}(\text{NSB}) - 1$ 。

CALL ELMSHHBX(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ELMNT, NDCLRS)

[引数]

ELMNT 以外は ELMSOFD でのものと同じ。

ELMNT(0:NDCLRS, 0:NDCLRS) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた ELMNT(J', J) に $\langle \Phi(J') | \mathcal{H}_{o,HH} + \mathcal{H}_{o,HH}^\dagger | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が ELMNT(J', J) に返される。ここで、 $J' \neq J$ かつ $J, J' = 0, 1, \dots, \text{IBASE}(\text{NSB}) - 1$ 。

A.1.4 CHECKS の下位ルーチン

CHECKS の下位ルーチンとして, INPRO および VEC01 (以上 A.5 節を参照) がある.

A.2 中規模以上行列用ルーチンの下位ルーチン (1.4 節のフローチャートを参照)

A.2.1 CRESZ の下位ルーチン

A.1.1 節に同じ.

A.2.2 ELMM の下位ルーチン

ELMM の下位ルーチンとして下記のルーチン CLSBND, ELMD, ELMO がある.

[1] 0 でない行列要素の位置と値を計算するための準備

```
CALL CLSBND(NS, NSLMAX, IPAIR, IBOND, LBOND, NBOND,  
                                                    IBSPAIR, IBSPIN, NBSPIN, MSGBC)
```

LBOND および NBOND の他, 下記の IBSPAIR, IBSPIN, NBSPIN の計算を行う. 以下での引数の説明は, 2.2.2 節の議論を参照しながら読んでいただきたい.

[引数]

NS, NSLMAX, IPAIR, IBOND, LBOND, NBOND, MSGBC は ELMM でのものと同じ.

IBSPAIR(2*IBOND+12) (出力; 4 バイト整数)

LH-対の両端のサイト ('境界サイト') の番号が IPAIR (3.1 節 [3] を参照) から抜き出され, $IPAIR(2*i-1) > IPAIR(2*i)$ である場合には両者が入れ換えられて, IBSPAIR(1) から IBSPAIR(2*n_{LH}) までに返される. (7) 式の例で, IPAIR を前述の通り

DATA IPAIR /1,2, 2,3, 3,4, 4,5, 5,6, 6,7, 7,8, 8,1, 12*0/

とし, かつ NSLMAX = 5 とすれば,

IBSPAIR(1)=5, IBSPAIR(2)=6, IBSPAIR(3)=1, IBSPAIR(4)=8

が返される. IBSPAIR を用いると, $p_{LH} (= 1, 2, \dots, n_{LH})$ で指定される LH-対の部分系 L 側の '境界サイト' の番号 ISITEL, およびその LH-対の部分系 H 側の '境界サイト' の番号 ISITEH が, それぞれ,

ISITEL=IBSPAIR(2*p_{LH}-1),

ISITEH=IBSPAIR(2*p_{LH})

で与えられる.

IBSPIN(IBOND+6, 2) (出力; 4 バイト整数)

IPAIR に与えられている順序で, 部分系 L に属する '境界サイト' の番号が IBSPIN(1, 1), IBSPIN(2, 1), ..., IBSPIN(n_{b,L}, 1) に, また, 部分系 H に属する '境界サイト' の番号が IBSPIN(1, 2), IBSPIN(2, 2), ..., IBSPIN(n_{b,L}, 2) に返される. (7) 式の例で, IPAIR を上述の通りとし, かつ NSLMAX = 5 とすれば,

IBSPIN(1, 1)=1, IBSPIN(2, 1)=5,

IBSPIN(1, 2)=6, IBSPIN(2, 2)=8

が返される.

NBSPIN(2) (出力; 4 バイト整数)

NBSPIN(1) に部分系 L に属する ‘境界サイト’ の数 $n_{b,L}$, NBSPIN(2) に部分系 H に属する ‘境界サイト’ の数 $n_{b,H}$ が返される.

[2] 格納領域の範囲内での対角行列要素の計算

CALL ELMD(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,
NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY,
HFIELD, MSGBC, DIAG, NDCLRD, LBOND, NBOND, LBASE,
IFLGDELM, IBSPAIR, IBSPIN, NBSPIN)

DIAG, LBASE, IFLGDELM の計算を行う.

[引数]

IBSPAIR, IBSPIN, NBSPIN は CLSBND でのものと同じで, それら以外は ELMM でのものと同じ.

ELMD の下位ルーチンとして, 下記のルーチン ELMDLLA, ELMDLLBX, ELMDHHA, ELMDHHBX, ELMDLS, ELMDHS がある. これらの引数の説明は, 2.1 節, 2.2 節, 2.2.2 節の議論を参照しながら読んでいただきたい.

CALL ELMDLLA(I, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,
NDCLR1, ISTAT2, ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, DIAG, LM)

全系のスピンの I 番目のグループについて, 部分系 L に関する $n_L(\mu_L^I)$ 個の対角行列要素 $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L) | \mathcal{H}_{d,LL} | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ ($k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$) をすべて格納する領域が ELMD (従って ELMM) における DIAG に残っている場合にのみ引用される.

[引数]

I, DIAG, LM 以外は ELMD でのものと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピンのグループの番号 I が与えられる.

DIAG(0:LM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた **DIAG**(k_L) に $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L) | \sum_{\ell \in L} h_d(\ell) | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ を加えた値が **DIAG**(k_L) に返される. ここで, $k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$.

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_L(\mu_L^I)$ の値, 即ち, **NSTAT**(NL(I), 0) が与えられる.

CALL ELMDLLBX(I, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,
 NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD,
 IBOND, MSGBC, DIAG, LM, LBOND, NBOND)

全系のスピン配列の I 番目のグループについて、部分系 L に関する $n_L(\mu_L^I)$ 個の対角行列要素 $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L) | \mathcal{H}_{d,LL} | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ ($k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$) をすべて格納する領域が ELMD (従って ELMM) における DIAG に残っている場合にのみ引用される。

[引数]

I, DIAG, LM 以外は ELMD でのものと同じ。

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる。

DIAG(0:LM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた DIAG(k_L) に $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L) | \sum_{\ell \in L, \ell' \in L} h_d(\ell, \ell') | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ を加えた値が DIAG(k_L) に返される。ここで、 $k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$ 。

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_L(\mu_L^I)$ の値、即ち、NSTAT(NL(I), 0) が与えられる。

CALL ELMDHHA(I, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,
 NDCLR1, ISTAT2, ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, DIAG, LM)

部分系 H に属するサイトが少なくとも 1 つ存在し、MSGBC(2) に 'SYMM' 以外が与えられており、かつ、全系のスピン配列の I 番目のグループについて、部分系 H に関する $n_H(\mu_H^I)$ 個の対角行列要素 $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H) | \mathcal{H}_{d,HH} | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ ($k_H = 0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I) - 1$) をすべて格納する領域が ELMD (従って ELMM) における DIAG に残っている場合にのみ引用される。

[引数]

I, DIAG, LM 以外は ELMD でのものと同じ。

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる。

DIAG(0:LM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた DIAG(k_H) に $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H) | \sum_{\ell \in H} h_d(\ell) | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ を加えた値が DIAG(k_H) に返される。ここで、 $k_H = 0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I) - 1$ 。

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_H(\mu_H^I)$ の値、即ち、NSTAT(NH(I), 1) が与えられる。

CALL ELMDHBBX(I, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,
 NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD,
 IBOND, MSGBC, DIAG, LM, LBOND, NBOND)

部分系 H に属するサイトが少なくとも 1 つ存在し, MSGBC(2) に 'SYMM' 以外が与えられており, かつ, 全系のスピン配列の I 番目のグループについて, 部分系 H に関する $n_H(\mu_H^I)$ 個の対角行列要素 $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H) | \mathcal{H}_{d,HH} | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ ($k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I) - 1$) をすべて格納する領域が ELMD (従って ELMM) における DIAG に残っている場合にのみ引用される.

[引数]

I, DIAG, LM 以外は ELMD でのものと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる.

DIAG(0:LM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた $\text{DIAG}(k_H)$ に $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H) | \sum_{(\ell \in H, \ell' \in H)} h_d(\ell, \ell') | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ を加えた値が $\text{DIAG}(k_H)$ に返される. ここで, $k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I) - 1$. なお, HH-対が存在しない場合には, 何の処理も行われない.

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_H(\mu_H^I)$ の値, 即ち, $\text{NSTAT}(\text{NH}(I), 1)$ が与えられる.

CALL ELMDLS(I, IST, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE,
 NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, DIAG, LM)

LH-対が少なくとも 1 つ存在し, かつ, 全系のスピン配列の I 番目のグループと部分系 L に属する $\ell_{b,L}$ 番目の '境界サイト' との組について, $n_L(\mu_L^I)$ 個の $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L) | S_{\ell_{b,L}}^z | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle = m_{\ell_{b,L}}$ ($k_L=0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$) をすべて格納する領域が ELMD (従って ELMM) における DIAG に残っている場合にのみ引用される.

[引数]

I, IST, DIAG, LM 以外は ELMD でのものと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる.

IST (入力; 4 バイト整数)

部分系 L に属する '境界サイト' の番号 $\ell_{b,L}$ が与えられる.

DIAG(0:LM-1) (出力; 8 バイト実数)

$\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L) | S_{\ell_{b,L}}^z | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle = m_{\ell_{b,L}}$ の値が $\text{DIAG}(k_L)$ に返される. ここで, $k_L=0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$.

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_L(\mu_L^I)$ の値, 即ち, $\text{NSTAT}(\text{NL}(I), 0)$ が与えられる.

CALL ELMDHS(I, IST, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE,

NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, DIAG, LM)

LH-対が少なくとも1つ存在し、かつ、全系のスピン配列のI番目のグループと部分系Hに属する $\ell_{b,H}$ 番目の‘境界サイト’との組について、 $n_H(\mu_H^I)$ 個の $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H) | S_{\ell_{b,H}}^z | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle = m_{\ell_{b,H}}(k_H = 0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I) - 1)$ をすべて格納する領域がELMD(従ってELMM)におけるDIAGに残っている場合にのみ引用される。

[引数]

I, IST, DIAG, LM 以外はELMDでのものと同じ。

I (入力; 4バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号Iが与えられる。

IST (入力; 4バイト整数)

部分系Hに属する‘境界サイト’の番号 $\ell_{b,H}$ が与えられる。

DIAG(0:LM-1) (出力; 8バイト実数)

$\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H) | S_{\ell_{b,H}}^z | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle = m_{\ell_{b,H}}$ の値がDIAG(k_H)に返される。ここで、 $k_H = 0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I) - 1$ 。

LM (入力; 4バイト整数)

$n_H(\mu_H^I)$ の値、即ち、NSTAT(NH(I), 1)が与えられる。

[3] 格納領域の範囲内での非対角行列要素の計算

CALL ELMO(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,

NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, MSGBC,

LBOND, NBOND, MBASE, IFLGOELM, IBSPAIR, IBSPIN,

NBSPIN, ELMNT, LOC, NDCLRM)

MBASE, IFLGOELM, ELMNT, LOCの計算を行う。

[引数]

IBSPAIR, IBSPIN, NBSPINはCLSBNDでのものと同じで、それら以外はELMMでのものと同じ。

ELMOの下位ルーチンとして、下記のルーチンELMOLLBX, ELMOHHBX, ELMOLSBX, ELMOHSBXがある。これらの引数の説明は、2.1節、2.2節、2.2.2節の議論を参照しながら読んでいただきたい。

CALL ELMOLLBX(I, KBOND, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,

ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ,

ABIQD, IBOND, ELMNT, LOC, LM, ICC)

p_{LL} 番目のLL-対について $J_{\ell,\ell'}^x \neq 0$ または $K_{\ell,\ell'} \neq 0$ であり、かつ、全系のスピン配列のI番目のグループと p_{LL} 番目のLL-対との組について、 $k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$ に対する $k_L'^{(1)}, k_L'^{(2)}$ ($K_{\ell,\ell'} = 0$ であれば前者のみ)のすべて、および $k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$ に対する $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L'^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$,

$\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(2)}) | h_o^{(2)}(\ell, \ell') | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ ($K_{\ell, \ell'} = 0$ であれば前者のみ) のすべてを格納する領域が, それぞれ, ELMO (従って ELMM) における LOC および ELMNT に残っている場合にのみ引用される.

[引数]

I, KBOND, ELMNT, LOC, LM, ICC 以外は ELMO でのものと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる.

KBOND (入力; 4 バイト整数)

IPAIR (3.1 節 [3] を参照) で決められたルールに従う LL-対の番号 LBOND(p_{LL} , 1) が与えられる.

ELMNT(0:LM-1, ICC) (出力; 8 バイト実数)

$\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値が ELMNT(k_L , 1) に返され, かつ, ICC=2 のときには, $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(2)}) | h_o^{(2)}(\ell, \ell') | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値が ELMNT(k_L , 2) に返される. ただし, $k_L^{(i)}$ ($i = 1, 2$) が存在しない場合には, ELMNT(k_L , i) に 0 が返される. ここで, $k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$.

LOC(0:LM-1, ICC) (出力; 4 バイト整数)

$k_L^{(1)}$ の値が LOC(k_L , 1) に返され, かつ, ICC=2 のときには, $k_L^{(2)}$ の値が LOC(k_L , 2) に返される. ただし, $k_L^{(i)}$ ($i = 1, 2$) が存在しない場合には, LOC(k_L , i) に k_L の値が返される. ここで, $k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$.

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_L(\mu_L^I)$ の値, 即ち, NSTAT(NL(I), 0) が与えられる.

ICC (入力; 4 バイト整数)

$J_{\ell, \ell'}^x \neq 0$ かつ $K_{\ell, \ell'} = 0$ のとき 1 が与えられ, $K_{\ell, \ell'} \neq 0$ のとき 2 が与えられる.

CALL ELMOHHBX(I, KBOND, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
 ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ,
 ABIQD, IBOND, ELMNT, LOC, LM, ICC)

MSGBC(2) に 'SYMM' 以外が与えられており, HH-対が少なくとも 1 つ存在し, p_{HH} 番目の HH-対について $J_{\ell, \ell'}^x \neq 0$ または $K_{\ell, \ell'} \neq 0$ であり, かつ, 全系のスピン配列の I 番目のグループと p_{HH} 番目の HH-対との組について, $k_H = 0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I) - 1$ に対する $k_H^{(1)}, k_H^{(2)}$ ($K_{\ell, \ell'} = 0$ であれば前者のみ) のすべて, および $k_H = 0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I) - 1$ に対する $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$, $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(2)}) | h_o^{(2)}(\ell, \ell') | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ ($K_{\ell, \ell'} = 0$ であれば前者のみ) のすべてを格納する領域が, それぞれ, ELMO (従って ELMM) における LOC および ELMNT に残っている場合にのみ引用される.

[引数]

I, KBOND, ELMNT, LOC, LM, ICC 以外は ELMO でのものと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる.

KBOND (入力; 4 バイト整数)

IPAIR (3.1 節 [3] を参照) で決められたルールに従う HH-対の番号 LBOND(p_{HH} , 2) が与えられる.

ELMNT(0:LM-1, ICC) (出力; 8 バイト実数)

$\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値が $\text{ELMNT}(k_H, 1)$ に返され, かつ, $\text{ICC}=2$ のときには, $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(2)}) | h_o^{(2)}(\ell, \ell') | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値が $\text{ELMNT}(k_H, 2)$ に返される. ただし, $k_H^{(i)}$ ($i = 1, 2$) が存在しない場合には, $\text{ELMNT}(k_H, i)$ に 0 が返される. ここで, $k_H = 0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I) - 1$.

LOC(0:LM-1, ICC) (出力; 4 バイト整数)

$k_H^{(1)}$ の値が $\text{LOC}(k_H, 1)$ に返され, かつ, $\text{ICC}=2$ のときには, $k_H^{(2)}$ の値が $\text{LOC}(k_H, 2)$ に返される. ただし, $k_H^{(i)}$ ($i = 1, 2$) が存在しない場合には, $\text{LOC}(k_H, i)$ に k_H の値が返される. ここで, $k_H = 0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I) - 1$.

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_H(\mu_H^I)$ の値, 即ち, $\text{NSTAT}(\text{NH}(\text{I}), 1)$ が与えられる.

ICC (入力; 4 バイト整数)

$J_{\ell, \ell'}^x \neq 0$ かつ $K_{\ell, \ell'} = 0$ のとき 1 が与えられ, $K_{\ell, \ell'} \neq 0$ のとき 2 が与えられる.

CALL ELMOLSBX(I, IST, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,

ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, ELMNT, LOC, LM, ICC)

LH-対が少なくとも 1 つ存在し, かつ, 全系のスピン配列の I 番目のグループと部分系 L に属する $\ell_{b,L}$ 番目の '境界サイト' との組について, $k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$ に対する $k_L^{(1),1}, k_L^{(1),2}, k_L^{(1),3}, k_L^{(2),1}$ (case (a) であれば $k_L^{(1),1}$ のみ) のすべて, および $k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$ に対する $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(1),1}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,L}}^+ | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$, $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(1),2}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,L}}^+ S_{\ell_{b,L}}^z | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$, $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(1),3}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,L}}^z S_{\ell_{b,L}}^+ | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$, $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(2),1}) | \frac{1}{2} S_{\ell_{b,L}}^+ S_{\ell_{b,L}}^+ | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ (case (a) であれば $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(1),1}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,L}}^+ | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ のみ) のすべてを格納する領域が, それぞれ, ELMO (従って ELMM) における LOC および ELMNT に残っている場合にのみ引用される. ここで, case (a) とはすべての LH-対 $\langle \ell_{b,L}, \ell_{b,H} \rangle$ に対して $K_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}} = 0$ である場合であり, case (b) とはそれ以外の場合である.

[引数]

I, IST, ELMNT, LOC, LM, ICC 以外は ELMO でのものと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる.

IST (入力; 4 バイト整数)

部分系 L に属する '境界サイト' の番号 $\ell_{b,L}$ が与えられる.

ELMNT(0:LM-1, ICC) (出力; 8 バイト実数)

$\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(1),1}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,L}}^+ | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値 1 が $\text{ELMNT}(k_L, 1)$ に返され, かつ, $\text{ICC}=4$ のときには, $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(1),2}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,L}}^+ S_{\ell_{b,L}}^z | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値 -1, $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(1),3}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,L}}^z S_{\ell_{b,L}}^+ | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値 1, $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(2),1}) | \frac{1}{2} S_{\ell_{b,L}}^+ S_{\ell_{b,L}}^+ | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値 1 が, それぞれ, $\text{ELMNT}(k_L, 2)$, $\text{ELMNT}(k_L, 3)$, $\text{ELMNT}(k_L, 4)$ に返される. ただし, $k_L^{(1),1}, k_L^{(1),2}, k_L^{(1),3}, k_L^{(2),1}$ が存在しない場合には, それぞれ, $\text{ELMNT}(k_L, 1)$, $\text{ELMNT}(k_L, 2)$, $\text{ELMNT}(k_L, 3)$, $\text{ELMNT}(k_L, 4)$ に 0 が返される. ここで, $k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$.

LOC(0:LM-1, ICC) (出力; 4 バイト整数)

$k_L^{(1),1}$ の値が $\text{LOC}(k_L, 1)$ に返され, かつ, $\text{ICC}=4$ のときには, $k_L^{(1),2}$, $k_L^{(1),3}$, $k_L^{(2),1}$ の値が, それぞれ, $\text{LOC}(k_L, 2)$, $\text{LOC}(k_L, 3)$, $\text{LOC}(k_L, 4)$ に返される. ただし, $k_L^{(1),1}$, $k_L^{(1),2}$, $k_L^{(1),3}$, $k_L^{(2),1}$ が存在しない場合には, それぞれ, $\text{LOC}(k_L, 1)$, $\text{LOC}(k_L, 2)$, $\text{LOC}(k_L, 3)$, $\text{LOC}(k_L, 4)$ に -1 が返される. ここで, $k_L=0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I)-1$.

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_L(\mu_L^I)$ の値, 即ち, $\text{NSTAT}(\text{NL}(\text{I}), 0)$ が与えられる.

ICC (入力; 4 バイト整数)

case (a) であれば 1 が与えられ, case (b) であれば 4 が与えられる.

CALL ELMOHSBX(I, IST, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,

ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, ELMNT, LOC, LM, ICC)

LH-対が少なくとも 1 つ存在し, かつ, 全系のスピン配列の I 番目のグループと部分系 H に属する $\ell_{b,H}$ 番目の '境界サイト' との組について, $k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I)-1$ に対する $k_H^{(1),1}$, $k_H^{(1),2}$, $k_H^{(1),3}$, $k_H^{(2),1}$ (case (a) であれば $k_H^{(1),1}$ のみ) のすべて, および $k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I)-1$ に対する $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1),1}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,H}}^- | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$, $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1),2}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,H}}^- S_{\ell_{b,H}}^z | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$, $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1),3}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,H}}^z S_{\ell_{b,H}}^- | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$, $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(2),1}) | \frac{1}{2} S_{\ell_{b,H}}^- S_{\ell_{b,H}}^- | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ (case (a) であれば $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1),1}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,H}}^- | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ のみ) のすべてを格納する領域が, それぞれ, ELMO (従って ELMN) における LOC および ELMNT に残っている場合にのみ引用される.

[引数]

I, IST, ELMNT, LOC, LM, ICC 以外は ELMO でのものと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる.

IST (入力; 4 バイト整数)

部分系 H に属する '境界サイト' の番号 $\ell_{b,H}$ が与えられる.

ELMNT(0:LM-1, ICC) (出力; 8 バイト実数)

$\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1),1}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,H}}^- | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値 1 が $\text{ELMNT}(k_H, 1)$ に返され, かつ, $\text{ICC}=4$ のときには, $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1),2}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,H}}^- S_{\ell_{b,H}}^z | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値 1, $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1),3}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,H}}^z S_{\ell_{b,H}}^- | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値 -1 , $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(2),1}) | \frac{1}{2} S_{\ell_{b,H}}^- S_{\ell_{b,H}}^- | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値 1 が, それぞれ, $\text{ELMNT}(k_H, 2)$, $\text{ELMNT}(k_H, 3)$, $\text{ELMNT}(k_H, 4)$ に返される. ただし, $k_H^{(1),1}$, $k_H^{(1),2}$, $k_H^{(1),3}$, $k_H^{(2),1}$ が存在しない場合には, それぞれ, $\text{ELMNT}(k_H, 1)$, $\text{ELMNT}(k_H, 2)$, $\text{ELMNT}(k_H, 3)$, $\text{ELMNT}(k_H, 4)$ に 0 が返される. ここで, $k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I)-1$.

LOC(0:LM-1, ICC) (出力; 4 バイト整数)

$k_H^{(1),1}$ の値が $\text{LOC}(k_H, 1)$ に返され, かつ, $\text{ICC}=4$ のときには, $k_H^{(1),2}$, $k_H^{(1),3}$, $k_H^{(2),1}$ の値が, それぞれ, $\text{LOC}(k_H, 2)$, $\text{LOC}(k_H, 3)$, $\text{LOC}(k_H, 4)$ に返される. ただし, $k_H^{(1),1}$, $k_H^{(1),2}$, $k_H^{(1),3}$, $k_H^{(2),1}$ が存在しない場合には, それぞれ, $\text{LOC}(k_H, 1)$, $\text{LOC}(k_H, 2)$, $\text{LOC}(k_H, 3)$, $\text{LOC}(k_H, 4)$ に -1 が返される. ここで, $k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I)-1$.

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_H(\mu_H^I)$ の値, 即ち, $\text{NSTAT}(\text{NH}(I), 1)$ が与えられる.

ICC (入力; 4 バイト整数)

case (a) であれば 1 が与えられ, case (b) であれば 4 が与えられる.

A.2.3 LNCZM の下位ルーチン

LNCZM の下位ルーチンとして, PAIRCHK (A.5 節を参照) の他に下記のルーチン LNCZ2E がある.

[1] Lanczös 法によるエネルギー固有値の計算

```
CALL LNCZ2E(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,  
            ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND,  
            ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, DIAG, NDCLRD, VEC,  
            NDCLRV, MDCLRV, LBOND, NBOND, LBASE,  
            MBASE, IFLGDELM, IFLGOELM, ELMNT,  
            LOC, NDCLRM, NVEC, IV, E, ITR)
```

E, ITR の計算を行う. また, $1 \leq NVEC \leq 4$ の場合, 即ち, LNCZMINV で固有ベクトルの計算も行う場合には, その計算の為に必要なデータをコモンブロック (common block) /VECDAT/ 中の COEF に書き込む.

[引数]

すべて LNCZM のものと同じ.

LNCZ2E の下位ルーチンとして, PAIRCHK, VEC02 (共に A.5 節を参照) の他に下記のルーチン VECINI, MLTPLY, MACRO2, MALNCNEC, MALNCTIT がある. これらおよびこれらの下位ルーチンの引数の説明は, 2.1 節, 2.2 節, 2.2.1 節, 2.2.2 節の議論を参照しながら読んでいただきたい.

[1-1] Lanczös 法の初期ベクトルの計算

```
CALL VECINI(IDIM, VS, IV)
```

[引数]

IV は LNCZ2E のものと同じ. ただし, すべての $IV(i)$ ($i=1, 2, \dots, 20$) に -1 以下または $IBASE(NSB)$ 以上の値が与えられている場合には, VECINI の実行の最初に, ランダムに選ばれた $0 \leq IV(i) \leq IDIM - 1$ を満たす値がすべての $IV(i)$ に与え直される.

IDIM (入力; 4 バイト整数)

行列の次元. $IBASE(NSB)$ の値が与えられる.

VS(0:IDIM-1) (出力; 4 バイト整数)

Lanczös 法の規格化された初期ベクトル V_{initial} の $J(=0, 1, \dots, IDIM-1)$ 成分 $\langle V_{\text{initial}} | \Phi(J) \rangle$ が $VS(J)$ に返される. 即ち, $0 \leq IV(i) \leq IDIM - 1$ を満たす値が与えられている $IV(i)$ について, $VS(IV(i))$ に $1/\sqrt{n_{IV}}$ が返され, それら以外の $VS(J)$ に 0 が返される. ここで, n_{IV} は $0 \leq IV(i) \leq IDIM - 1$ を満たす $IV(i)$ のうちの異なるものの数である.

VECINI の下位ルーチンとして, VEC01, INPRO, DIVER (A.5 節を参照) および RAND, IRAND (1.5 節を参照) がある.

[1-2] Lanczös 法の実行に必要な, ベクトルに他のベクトルとハミルトニアンとの積を加える計算

```
CALL MLTPLY(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,  
            ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD,  
            MSGBC, DIAG, NDCLRD, VD, VS, IDIM, LBOND, NBOND,  
            LBASE, MBASE, IFLGDELM, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM)
```

すべての $J(=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1)$ について, ‘規格化されたベクトル V_D の J 成分 $\langle V_D | \Phi(J) \rangle$ に他の規格化された状態ベクトル V_S とハミルトニアン \mathcal{H} との積の J 成分 $\sum_{J'} \langle V_S | \Phi(J') \rangle \langle \Phi(J') | \mathcal{H} | \Phi(J) \rangle$ を加えたものを改めて $\langle V_D | \Phi(J) \rangle$ とする’ という処理が行われる.

[引数]

IDIM, VD, VS 以外は LNCZ2E でのものと同じ.

IDIM (入力; 4 バイト整数)

行列の次元. IBASE(NSB) の値が与えられる.

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

ベクトル V_D の J 成分 $\langle V_D | \Phi(J) \rangle$ が $\text{VD}(J)$ に与えられ, それにベクトル V_S とハミルトニアンとの積の J 成分 $\sum_{J'} \langle V_S | \Phi(J') \rangle \langle \Phi(J') | \mathcal{H} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $\text{VD}(J)$ に返される. ここで, $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

VS(0:IDIM-1) (入力; 4 バイト整数)

規格化されたベクトル V_S の J 成分 $\langle V_S | \Phi(J) \rangle$ が $\text{VS}(J)$ に与えられる. ここで, $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.
なお, MLTPLY の実行後, VS の内容はそのまま保存される.

MLTPLY の下位ルーチンとして, 下記のルーチン MLTD, MULO がある.

[1-2-1]

```
CALL MLTD(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2,  
          IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD, MSGBC,  
          DIAG, NDCLRD, VD, VS, IDIM, LBOND, NBOND, LBASE, IFLGDELM)
```

MLTPLY で行われる処理のうち, 対角項ハミルトニアン \mathcal{H}_d に関する部分が行われる.

[引数]

VD 以外は MLTPLY でのものと同じ.

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた $\text{VD}(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_d | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $\text{VD}(J)$ に返される. ここで, $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

MLTD の下位ルーチンとして, VEC01 (A.5 節を参照) の他に下記のルーチン MLTDLL, MLTDLH, MLTDHH がある.

[1-2-1-1]

CALL MLTDLL(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2,
IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD, MSGBC,
DIAG, NDCLRD, VD, VS, IDIM, LBOND, NBOND, LBASE, IFLGDELM)

MLTD で行われる処理のうち、部分系 L についての対角項ハミルトニアン $\mathcal{H}_{d,LL}$ に関する部分、および部分系 H についての対角項ハミルトニアン $\mathcal{H}_{d,HH}$ に関する部分の一部 (場合によっては全部) が行われる。

[引数]

VD 以外は MLTD でのもと同じ。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{d,LL} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される。ここで、 $J = 0, 1, \dots, IDIM-1$ 。ただし、部分系 H に属するサイトが少なくとも 1 つ存在する場合において、 $IFLGDELM(I, 1)=IFLGDELM(I, 2)=1$ を満たす番号 I のグループに属する全系のスピン配列の番号 J については、与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{d,LL} + \mathcal{H}_{d,HH} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される。

MLTDLL の下位ルーチンとして、下記のルーチン MLTDEL, MLTDLLEL, MLTDLLBX がある。

CALL MLTDEL(I, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,
NDCLR1, ISTAT2, DIAGL, LML, DIAGH, LMH, VD, VS, IDIM)

部分系 H に属するサイトが少なくとも 1 つ存在し、かつ、全系のスピン配列の I 番目のグループについて $IFLGDELM(I, 1)=IFLGDELM(I, 2)=1$ である場合に引用される。

[引数]

I, DIAGL, LML, DIAGH, LMH, VD 以外は MLTDLL でのもと同じ。

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる。

DIAGL(0:LML-1) (入力; 8 バイト実数)

DIAGL(k_L) に $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L) | \mathcal{H}_{d,LL} | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値が与えられる。ここで、 $k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I)-1$ 。

LML (入力; 4 バイト整数)

$n_L(\mu_L^I)$ の値、即ち、 $NSTAT(NL(I), 0)$ が与えられる。

DIAGH(0:LMH-1) (入力; 8 バイト実数)

DIAGH(k_H) に $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H) | \mathcal{H}_{d,HH} | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値が与えられる。ここで、 $k_H = 0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I)-1$ 。

LMH (入力; 4 バイト整数)

$n_H(\mu_H^I)$ の値、即ち、 $NSTAT(NH(I), 1)$ が与えられる。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピン配列の番号 J について、与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{d,LL} + \mathcal{H}_{d,HH} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される。

CALL MLTDLLEL(I, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
 ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, DIAG, LM, VD, VS, IDIM)

全系のスピン配列の I 番目のグループについて IFLGDELM(I, 1)=1 である場合 (ただし, 部分系 H に属するサイトが少なくとも 1 つ存在し, かつ, IFLGDELM(I, 1)=IFLGDELM(I, 2)=1 である場合を除く) に引用される.

[引数]

I, DIAG, LM, VD 以外は MLTDLL でのものと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる.

DIAG(0:LM-1) (入力; 8 バイト実数)

DIAG(k_L) に $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L) | \mathcal{H}_{d,LL} | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値が与えられる. ここで, $k_L = 0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I) - 1$.

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_L(\mu_L^I)$ の値, 即ち, NSTAT(NL(I), 0) が与えられる.

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピン配列の番号 J について, 与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{d,LL} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される.

CALL MLTDLLBX(I, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,
 NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND,
 ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, VD, VS, IDIM, LBOND, NBOND)

全系のスピン配列の I 番目のグループについて IFLGDELM(I, 1)=0 である場合に引用される.

[引数]

I, VD 以外は MLTDLL でのものと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる.

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピン配列の番号 J について, 与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{d,LL} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される.

[1-2-1-2]

CALL MLTDLH(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
 ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, DIAG, NDCLR1,
 VD, VS, IDIM, LBOND, NBOND, LBASE, IFLGDELM)

部分系 H に属するサイトが少なくとも 1 つ存在する場合に引用され, MLTD で行われる処理のうち, 两部分系 L, H についての対角項ハミルトニアン $\mathcal{H}_{d,LH}$ に関する部分が行われる.

[引数]

VD 以外は MLTD でのものと同じ.

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{d,LH} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される. ここで, $J=0, 1, \dots, IDIM-1$.

MLTDLH の下位ルーチンとして, 下記のルーチン MLTDLHEL, MLTDLHBX がある.

CALL MLTDLHEL(I, KBOND, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
 ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD,
 IBOND, DIAGL, LML, DIAGH, LMH, VD, VS, IDIM)

全系のスピンの I 番目のグループと p_{LH} 番目の LH-対 との組について IFLGDELM(I, $2+p_{LH}$)=1 である場合に引用される.

[引数]

I, KBOND, DIAGL, LML, DIAGH, LMH, VD 以外は MLTDLH でのものと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピンの I 番目のグループの番号 I が与えられる.

KBOND (入力; 4 バイト整数)

IPAIR (3.1 節 [3] を参照) で決められたルールに従う LH-対の番号 LBOND(p_{LH} , 3) が与えられる.

DIAGL(0:LML-1) (入力; 8 バイト実数)

DIAGL(k_L) に $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L) | S_{\ell_{b,L}}^z | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle = m_{\ell_{b,L}}$ の値が与えられる. ここで, $\ell_{b,L}$ は LBOND(p_{LH} , 3) 番目の LH-対に属する部分系 L 側の '境界サイト' の番号であり, また, $k_L=0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I)-1$.

LML (入力; 4 バイト整数)

$n_L(\mu_L^I)$ の値, 即ち, NSTAT(NL(I), 0) が与えられる.

DIAGH(0:LMH-1) (入力; 8 バイト実数)

DIAGH(k_H) に $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H) | S_{\ell_{b,H}}^z | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle = m_{\ell_{b,H}}$ の値が与えられる. ここで, $\ell_{b,H}$ は LBOND(p_{LH} , 3) 番目の LH-対に属する部分系 H 側の '境界サイト' の番号であり, また, $k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I)-1$.

LMH (入力; 4 バイト整数)

$n_H(\mu_H^I)$ の値, 即ち, NSTAT(NH(I), 1) が与えられる.

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピンの番号 J について, 与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{d,LH} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される. ただし, LBOND(p_{LH} , 3) 番目の LH-対に対して $J_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}}^z = K_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}} = 0$ である場合には, 何の処理も行われない.

CALL MLTDLHBX(I, KBOND, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
 ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ,
 ABIQD, IBOND, VD, VS, IDIM)

全系のスピンの I 番目のグループと p_{LH} 番目の LH-対 との組について IFLGDELM(I, 2+ p_{LH})=0 である場合に引用される。

[引数]

I, KBOND, VD 以外は MLTDLH でのものと同じ。

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピンのグループの番号 I が与えられる。

KBOND (入力; 4 バイト整数)

IPAIR (3.1 節 [3] を参照) で決められたルールに従う LH-対の番号 LBOND(p_{LH} , 3) が与えられる。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピンの番号 J について、与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{d,LH} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される。ただし、LBOND(p_{LH} , 3) 番目の LH-対に対して $J_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}}^z = K_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}} = 0$ である場合には、何の処理も行われない。

[1-2-1-3]

CALL MLTDHHC(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2,
 IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD, MSGBC,
 DIAG, NDCLR2, VD, VS, IDIM, LBOND, NBOND, LBASE, IFLGDELM)

部分系 H に属するサイトが少なくとも 1 つ存在する場合に引用され、MLTD で行われる処理のうち、部分系 H についての対角項ハミルトニアン $\mathcal{H}_{d,HH}$ に関する部分 (ただし、MLTDLL ですでに処理されている部分を除く) が行われる。

[引数]

VD 以外は MLTD でのものと同じ。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{d,HH} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される。ここで、 $J = 0, 1, \dots, IDIM-1$ (ただし、IFLGDELM(I, 1)=IFLGDELM(I, 2)=1 を満たす番号 I のグループに属する全系のスピンの番号 J を除く)。

MLTDHHC の下位ルーチンとして、下記のルーチン MLTDHHEL, MLTDHHCB がある。

CALL MLTDHHEL(I, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, DIAG, LM, VD, VS, IDIM)

全系のスピンの配列の I 番目のグループについて IFLGDELM(I, 1)=0, IFLGDELM(I, 2)=1 である場合に引用される。

[引数]

I, DIAG, LM, VD 以外は MLTDHH でのものと同じ。

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピンの配列のグループの番号 I が与えられる。

DIAG(0:LM-1) (入力; 8 バイト実数)

DIAG(k_H) に $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H) | \mathcal{H}_{d,HH} | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値が与えられる。ここで, $k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I)-1$ 。

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_H(\mu_H^I)$ の値, 即ち, NSTAT(NL(H), 1) が与えられる。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピンの配列の番号 J について, 与えられた VD(J) に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{d,HH} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が VD(J) に返される。

CALL MLTDHBBX(I, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,
NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND,
ANISTRPY, HFIELD, MSGBC, VD, VS, IDIM, LBOND, NBOND)

全系のスピンの配列の I 番目のグループについて IFLGDELM(I, 2)=0 である場合に引用される。

[引数]

I, VD 以外は MLTDHH でのものと同じ。

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピンの配列のグループの番号 I が与えられる。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピンの配列の番号 J について, 与えられた VD(J) に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J) | \mathcal{H}_{d,HH} | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が VD(J) に返される。

[1-2-2]

CALL MLTO(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, VD, VS, IDIM,
LBOND, NBOND, MBASE, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM)

MLTPLY で行われる処理のうち、非対角項ハミルトニアン $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_0^\dagger$ に関する部分が行われる。

[引数]

VD 以外は MLTPLY のものと同じ。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた $VD(J)$ に $\sum_{J'(\neq J)} \langle V_S | \Phi(J') \rangle \langle \Phi(J') | \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_0^\dagger | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される。ここで、 $J=0, 1, \dots, IDIM-1$ 。

MLTO の下位ルーチンとして、下記のルーチン MLTOLL, MLTOLH, MLTOHH がある。

[1-2-2-1]

CALL MLTOLL(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, VD, VS, IDIM,
LBOND, NBOND, MBASE, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM)

MLTO で行われる処理のうち、部分系 L についての非対角項ハミルトニアン $\mathcal{H}_{0,LL} + \mathcal{H}_{0,LL}^\dagger$ に関する部分が行われる。

[引数]

VD 以外は MLTO のものと同じ。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた $VD(J)$ に $\sum_{J'(\neq J)} \langle V_S | \Phi(J') \rangle \langle \Phi(J') | \mathcal{H}_{0,LL} + \mathcal{H}_{0,LL}^\dagger | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される。ここで、 $J=0, 1, \dots, IDIM-1$ 。

MLTOLL の下位ルーチンとして、下記のルーチン MLTOLLEL, MLTOLLBX がある。

CALL MLTOLLEL(I, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,
NDCLR1, ISTAT2, VD, VS, IDIM, ELMNT, LOC, LM, ICC)

p_{LL} 番目の LL-対について $J_{\ell,\ell'}^x \neq 0$ または $K_{\ell,\ell'} \neq 0$ であり、かつ、全系のスピン配列の I 番目のグループについて $IFLGOELM(I, LBOND(p_{LL}, 1))=1$ である場合に引用される。

[引数]

I, VD, ELMNT, LOC, LM, ICC 以外は MLTOLL のものと同じ。

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピン配列の番号 J について、 $\langle \Phi(J') | h_o^{(i)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ ($\ell \in L, \ell' \in L$) に 0 でない値を与える J' を $J^{(i)}$ とする ($i=1, 2$). $J_{\ell, \ell'}^x \neq 0$ かつ $K_{\ell, \ell'} = 0$ のときには、与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返され、また、与えられた $VD(J^{(1)})$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J^{(1)})$ に返される。ただし、 $LOC(k_L, 1)$ より $k_L^{(1)}$ 、従って $J^{(1)}$ 、が存在しないと判定される場合には、何の処理も行われぬ。一方、 $K_{\ell, \ell'} \neq 0$ のときには、与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle + \langle V_S | \Phi(J^{(2)}) \rangle \langle \Phi(J^{(2)}) | h_o^{(2)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返され、また、与えられた $VD(J^{(i)})$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J^{(i)}) | h_o^{(i)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J^{(i)})$ に返される。ただし、 $LOC(k_L, 1)$ より $k_L^{(1)}$ 、従って $J^{(1)}$ 、が存在しないと判定される場合には、 $J^{(1)}$ に関する処理は行われず、 $LOC(k_L, 2)$ より $k_L^{(2)}$ 、従って $J^{(2)}$ 、が存在しないと判定される場合には、 $J^{(2)}$ に関する処理は行われぬ。

ELMNT(0:LM-1, ICC) (入力; 8 バイト実数)

ELMNT($k_L, 1$) に $\langle \phi_L(\mu_L^1, k_L^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \phi_L(\mu_L^1, k_L) \rangle$ の値が与えられ、かつ、 $ICC=2$ のときには、ELMNT($k_L, 2$) に $\langle \phi_L(\mu_L^1, k_L^{(2)}) | h_o^{(2)}(\ell, \ell') | \phi_L(\mu_L^1, k_L) \rangle$ の値が与えられる。ただし、 $k_L^{(i)}$ ($i=1, 2$) が存在しない場合には、ELMNT(k_L, i) に 0 が与えられる。ここで、 $k_L=0, 1, \dots, n_L(\mu_L^1)-1$ 。

LOC(0:LM-1, ICC) (入力; 4 バイト整数)

LOC($k_L, 1$) に $k_L^{(1)}$ の値が与えられ、かつ、 $ICC=2$ のときには、LOC($k_L, 2$) に $k_L^{(2)}$ の値が与えられる。ただし、 $k_L^{(i)}$ ($i=1, 2$) が存在しない場合には、LOC(k_L, i) に k_L の値が与えられる。ここで、 $k_L=0, 1, \dots, n_L(\mu_L^1)-1$ 。

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_L(\mu_L^1)$ の値、即ち、NSTAT(NL(I), 0) が与えられる。

ICC (入力; 4 バイト整数)

$J_{\ell, \ell'}^x \neq 0$ かつ $K_{\ell, \ell'} = 0$ のとき 1 が与えられ、 $K_{\ell, \ell'} \neq 0$ のとき 2 が与えられる。即ち、MBase(I, LBOND($p_{LL}, 1$), 3) の値が与えられる。

CALL MLTOLLBX(I, KIS, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBase, NSTAT, ISTAT1,
NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, VD, VS, IDIM)

p_{LL} 番目の LL-対について $J_{\ell, \ell'}^x \neq 0$ または $K_{\ell, \ell'} \neq 0$ であり、かつ、全系のスピン配列の I 番目のグループについて IFLGOELM(I, LBOND($p_{LL}, 1$))=0 である場合に引用される。

[引数]

I, KIS, VD 以外は MLTDLL でのものと同じ。

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる。

KIS (入力; 4 バイト整数)

IPAIR (3.1 節 [3] を参照) で決められたルールに従う LL-対の番号 LBOND($p_{LL}, 1$) が与えられる。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピン配列の番号 J について、 $\langle \Phi(J') | h_o^{(i)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ ($\ell \in L, \ell' \in L$) に 0 でない値を与える J' を $J^{(i)}$ とする ($i=1, 2$). $J_{\ell, \ell'}^x \neq 0$ かつ $K_{\ell, \ell'} = 0$ のときには、与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返され、また、与えられた $VD(J^{(1)})$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J^{(1)})$ に返される。ただし、 $J^{(1)}$ (即ち、 $k_L^{(1)}$) が存在しない場合には、何の処理も行われない。一方、 $K_{\ell, \ell'} \neq 0$ のときには、与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle + \langle V_S | \Phi(J^{(2)}) \rangle \langle \Phi(J^{(2)}) | h_o^{(2)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返され、また、与えられた $VD(J^{(i)})$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J^{(i)}) | h_o^{(i)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J^{(i)})$ に返される。ただし、 $J^{(1)}$ (即ち、 $k_L^{(1)}$) が存在しない場合には、 $J^{(1)}$ に関する処理は行われず、 $J^{(2)}$ (即ち、 $k_L^{(2)}$) が存在しない場合には、 $J^{(2)}$ に関する処理は行われない。

[1-2-2-2]

CALL MLTOLH(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, VD, VS, IDIM,
LBOND, NBOND, MBASE, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM)

部分系 H に属するサイトが少なくとも 1 つ存在する場合に引用され、MLTO で行われる処理のうち、両部分系 L, H についての非対角項ハミルトニアン $\mathcal{H}_{o, LH} + \mathcal{H}_{o, LH}^\dagger$ に関する部分が行われる。

[引数]

VD 以外は MLTO でのものと同じ。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた $VD(J)$ に $\sum_{J'(\neq J)} \langle V_S | \Phi(J') \rangle \langle \Phi(J') | \mathcal{H}_{o, LH} + \mathcal{H}_{o, LH}^\dagger | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される。ここで、 $J=0, 1, \dots, IDIM-1$ 。

MLTOLH の下位ルーチンとして、下記のルーチン MLTOLHEL, MLTOLHBX がある。

CALL MLTOLHEL(I, KBOND, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,
NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND,
VD, VS, IDIM, ELMNTL, LOCL, LML, ELMNTH, LOCH, LMH, ICC)

全系のスピン配列の I 番目のグループと p_{LH} 番目の LH-対 との組について IFLGOELM(I, LBOND(p_{LH} , 3))=1 である場合に引用される。

[引数]

I, KBOND, VD, ELMNTL, LOCL, LML, ELMNTH, LOCH, LMH, ICC 以外は MLTOLH でのものと同じ。

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる。

KBOND (入力; 4 バイト整数)

IPAIR (3.1 節 [3] を参照) で決められたルールに従う LH-対の番号 LBOND(p_{LH} , 3) が与えられる。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピン配列の番号 J について、 $\langle \Phi(J') | h_o^{(i)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle$ (ここで、 $\ell_{b,L}, \ell_{b,H}$ は、それぞれ、LBOND($p_{LH}, 3$) 番目の LH-対に属する部分系 L, H 側の‘境界サイト’の番号) に 0 でない値を与える J' を $J'^{(i)}$ とする ($i=1, 2$). $J_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}}^x \neq 0$ かつ $K_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}} = 0$ のときには、与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J'^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J'^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返され、また、与えられた $VD(J'^{(1)})$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J'^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J'^{(1)})$ に返される。ただし、 $J'^{(1)}$ が存在しない場合 (即ち、I が最大値 NSB-1 をとるか、或は、LOCL($k_L, 1$), LOCH($k_H, 1$) より $k_L^{(1),1}, k_H^{(1),1}$ のうちの少なくとも一方が存在しないと判定される場合) には、何の処理も行われない。一方、 $K_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}} \neq 0$ のときには、与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J'^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J'^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle + \langle V_S | \Phi(J'^{(2)}) \rangle \langle \Phi(J'^{(2)}) | h_o^{(2)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返され、また、与えられた $VD(J'^{(i)})$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J'^{(i)}) | h_o^{(i)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J'^{(i)})$ に返される。ただし、 $J'^{(1)}$ が存在しない場合 (即ち、I=NSB-1 であるか、或は、LOCL($k_L, 1$), LOCH($k_H, 1$) より $k_L^{(1),1}, k_H^{(1),1}$ のうちの少なくとも一方が存在しないと判定される場合) には、 $J'^{(1)}$ に関する処理は行われず、また、 $J'^{(2)}$ が存在しない場合 (即ち、I=NSB-1, NSB-2 であるか、或は、LOCL($k_L, 4$), LOCH($k_H, 4$) より $k_L^{(2),1}, k_H^{(2),1}$ のうちの少なくとも一方が存在しないと判定される場合) には、 $J'^{(2)}$ に関する処理は行われない。なお、 $J_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}}^x = K_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}} = 0$ のときには、何の処理も行われない。

ELMNTL(0:LML-1, ICC) (入力; 8 バイト実数)

ELMNTL($k_L, 1$) に $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(1),1}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,L}}^+ | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値 1 が与えられ、かつ、ICC=4 のときには、ELMNTL($k_L, 2$), ELMNTL($k_L, 3$), ELMNTL($k_L, 4$) に、それぞれ、 $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(1),2}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,L}}^+ S_{\ell_{b,L}}^z | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値 -1, $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(1),3}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,L}}^z S_{\ell_{b,L}}^+ | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値 1, $\langle \phi_L(\mu_L^I, k_L^{(2),1}) | \frac{1}{2} S_{\ell_{b,L}}^+ S_{\ell_{b,L}}^+ | \phi_L(\mu_L^I, k_L) \rangle$ の値 1 が与えられる。ただし、 $k_L^{(1),1}, k_L^{(1),2}, k_L^{(1),3}, k_L^{(2),1}$ が存在しない場合には、それぞれ、ELMNTL($k_L, 1$), ELMNTL($k_L, 2$), ELMNTL($k_L, 3$), ELMNTL($k_L, 4$) に 0 が与えられる。ここで、 $k_L=0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I)-1$ 。

LOCL(0:LML-1, ICC) (入力; 4 バイト整数)

LOCL($k_L, 1$) に $k_L^{(1),1}$ の値が与えられ、かつ、ICC=4 のときには、LOCL($k_L, 2$), LOCL($k_L, 3$), LOCL($k_L, 4$) に、それぞれ、 $k_L^{(1),2}, k_L^{(1),3}, k_L^{(2),1}$ の値が与えられる。ただし、 $k_L^{(1),1}, k_L^{(1),2}, k_L^{(1),3}, k_L^{(2),1}$ が存在しない場合には、それぞれ、LOCL($k_L, 1$), LOCL($k_L, 2$), LOCL($k_L, 3$), LOCL($k_L, 4$) に -1 が与えられる。ここで、 $k_L=0, 1, \dots, n_L(\mu_L^I)-1$ 。

LML (入力; 4 バイト整数)

$n_L(\mu_L^I)$ の値、即ち、NSTAT(NL(I), 0) が与えられる。

ELMNTH(0:LMH-1, ICC) (入力; 8 バイト実数)

ELMNTH($k_H, 1$) に $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1),1}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,H}}^- | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値 1 が与えられ、かつ、ICC=4 のときには、ELMNTH($k_H, 2$), ELMNTH($k_H, 3$), ELMNTH($k_H, 4$) に、それぞれ、 $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1),2}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,H}}^- S_{\ell_{b,H}}^z | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値 1, $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1),3}) | \frac{1}{\sqrt{2}} S_{\ell_{b,H}}^z S_{\ell_{b,H}}^- | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値 -1, $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(2),1}) | \frac{1}{2} S_{\ell_{b,H}}^- S_{\ell_{b,H}}^- | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値 1 が与えられる。ただし、 $k_H^{(1),1}, k_H^{(1),2}, k_H^{(1),3}, k_H^{(2),1}$ が存在しない場合には、それぞれ、ELMNTH($k_H, 1$), ELMNTH($k_H, 2$), ELMNTH($k_H, 3$), ELMNTH($k_H, 4$) に 0 が与えられる。ここで、 $k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I)-1$ 。

LOCH(0:LMH-1, ICC) (入力; 4 バイト整数)

LOCH($k_H, 1$) に $k_H^{(1),1}$ の値が与えられ、かつ、ICC=4 のときには、LOCH($k_H, 2$), LOCH($k_H, 3$), LOCH($k_H, 4$) に、それぞれ、 $k_H^{(1),2}$, $k_H^{(1),3}$, $k_H^{(2),1}$ の値が与えられる。ただし、 $k_H^{(1),1}$, $k_H^{(1),2}$, $k_H^{(1),3}$, $k_H^{(2),1}$ が存在しない場合には、それぞれ、LOCH($k_H, 1$), LOCH($k_H, 2$), LOCH($k_H, 3$), LOCH($k_H, 4$) に -1 が与えられる。ここで、 $k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I)-1$ 。

LMH (入力; 4 バイト整数)

$n_H(\mu_H^I)$ の値、即ち、NSTAT(NH(I), 1) が与えられる。

ICC (入力; 4 バイト整数)

case (a) であれば 1 が与えられ、case (b) であれば 4 が与えられる。即ち、MBASE(I, LBOND($p_{LH}, 3$), 3) の値が与えられる。

CALL MLTOLHBX(I, KBOND, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,
ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ,
ABIQD, IBOND, VD, VS, IDIM)

全系のスピン配列の I 番目のグループと p_{LH} 番目の LH-対 との組について IFLGOELM(I, LBOND($p_{LH}, 3$))=0 である場合に引用される。

[引数]

I, KBOND, VD 以外は MLTOLH でのものと同じ。

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる。

KBOND (入力; 4 バイト整数)

IPAIR (3.1 節 [3] を参照) で決められたルールに従う LH-対の番号 LBOND($p_{LH}, 3$) が与えられる。

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピン配列の番号 J について、 $\langle \Phi(J') | h_o^{(i)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle$ (ここで、 $\ell_{b,L}, \ell_{b,H}$ は、それぞれ、LBOND($p_{LH}, 3$) 番目の LH-対に属する部分系 L, H 側の '境界サイト' の番号) に 0 でない値を与える J' を $J^{(i)}$ とする ($i=1, 2$)。 $J_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}}^x \neq 0$ かつ $K_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}} = 0$ のときには、与えられた VD(J) に $\langle V_S | \Phi(J^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が VD(J) に返され、また、与えられた VD($J^{(1)}$) に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が VD($J^{(1)}$) に返される。ただし、 $J^{(1)}$ が存在しない場合 (即ち、 $k_L^{(1),1}$, $k_H^{(1),1}$ のうちの少なくとも一方が存在しない場合) には、何の処理も行われない。一方、 $K_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}} \neq 0$ のときには、与えられた VD(J) に $\langle V_S | \Phi(J^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle + \langle V_S | \Phi(J^{(2)}) \rangle \langle \Phi(J^{(2)}) | h_o^{(2)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が VD(J) に返され、また、与えられた VD($J^{(i)}$) に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J^{(i)}) | h_o^{(i)}(\ell_{b,L}, \ell_{b,H}) | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が VD($J^{(i)}$) に返される。ただし、 $J^{(1)}$ が存在しない場合 (即ち、 $k_L^{(1),1}$, $k_H^{(1),1}$ のうちの少なくとも一方が存在しない場合) には、 $J^{(1)}$ に関する処理は行われず、また、 $J^{(2)}$ が存在しない場合 (即ち、 $k_L^{(2),1}$, $k_H^{(2),1}$ のうちの少なくとも一方が存在しない場合) には、 $J^{(2)}$ に関する処理は行われない。なお、 $J_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}}^x = K_{\ell_{b,L}, \ell_{b,H}} = 0$ のときには、何の処理も行われない。

[1-2-2-3]

CALL MLTOHH(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, VD, VS, IDIM,
LBOND, NBOND, MBASE, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM)

HH-対が少なくとも 1 つ存在する場合に引用され, MLTO で行われる処理のうち, 部分系 H についての非対角項ハミルトニアン $\mathcal{H}_{o,HH} + \mathcal{H}_{o,HH}^\dagger$ に関する部分が行われる.

[引数]

VD 以外は MLTO ののと同じ.

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

与えられた $VD(J)$ に $\sum_{J'(\neq J)} \langle V_S | \Phi(J') \rangle \langle \Phi(J') | \mathcal{H}_{o,HH} + \mathcal{H}_{o,HH}^\dagger | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返される. ここで, $J=0, 1, \dots, IDIM-1$.

MLTOHH の下位ルーチンとして, 下記のルーチン MLTOHHEL, MLTOHHBX がある.

CALL MLTOHHEL(I, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1,
NDCLR1, ISTAT2, VD, VS, IDIM, ELMNT, LOC, LM, ICC)

p_{HH} 番目の HH-対について $J_{\ell,\ell'}^x \neq 0$ または $K_{\ell,\ell'} \neq 0$ であり, かつ, 全系のスピン配列の I 番目のグループについて $IFLGOELM(I, LBOND(p_{HH}, 2))=1$ である場合に引用される.

[引数]

I, VD, ELMNT, LOC, LM, ICC 以外は MLTOHH ののと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる.

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピン配列の番号 J について, $\langle \Phi(J') | h_o^{(i)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ ($\ell \in H, \ell' \in H$) に 0 でない値を与える J' を $J^{(i)}$ とする ($i=1, 2$). $J_{\ell,\ell'}^x \neq 0$ かつ $K_{\ell,\ell'} = 0$ のときには, 与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返され, また, 与えられた $VD(J^{(1)})$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J^{(1)})$ に返される. ただし, $LOC(k_H, 1)$ より $k_H^{(1)}$, 従って $J^{(1)}$, が存在しないと判定される場合には, 何の処理も行われない. 一方, $K_{\ell,\ell'} \neq 0$ のときには, 与えられた $VD(J)$ に $\langle V_S | \Phi(J^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle + \langle V_S | \Phi(J^{(2)}) \rangle \langle \Phi(J^{(2)}) | h_o^{(2)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J)$ に返され, また, 与えられた $VD(J^{(i)})$ に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J^{(i)}) | h_o^{(i)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が $VD(J^{(i)})$ に返される. ただし, $LOC(k_H, 1)$ より $k_H^{(1)}$, 従って $J^{(1)}$, が存在しないと判定される場合には, $J^{(1)}$ に関する処理は行われず, $LOC(k_H, 2)$ より $k_H^{(2)}$, 従って $J^{(2)}$, が存在しないと判定される場合には, $J^{(2)}$ に関する処理は行われない.

ELMNT(0:LM-1, ICC) (入力; 8 バイト実数)

ELMNT($k_H, 1$) に $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(1)}) | h_o^{(1)}(\ell, \ell') | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値が与えられ, かつ, $ICC=2$ のときには, ELMNT($k_H, 2$) に $\langle \phi_H(\mu_H^I, k_H^{(2)}) | h_o^{(2)}(\ell, \ell') | \phi_H(\mu_H^I, k_H) \rangle$ の値が与えられる. ただし, $k_H^{(i)}$ ($i=1, 2$) が存在しない場合には, ELMNT(k_H, i) に 0 が与えられる. ここで, $k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I)-1$.

LOC(0:LM-1, ICC) (入力; 4 バイト整数)

LOC(k_H , 1) に $k_H^{(1)}$ の値が与えられ, かつ, ICC=2 のときには, LOC(k_H , 2) に $k_H^{(2)}$ の値が与えられる. ただし, $k_H^{(i)}$ ($i=1, 2$) が存在しない場合には, LOC(k_H , i) に k_H の値が与えられる. ここで, $k_H=0, 1, \dots, n_H(\mu_H^I)-1$.

LM (入力; 4 バイト整数)

$n_H(\mu_H^I)$ の値, 即ち, NSTAT(NH(I), 1) が与えられる.

ICC (入力; 4 バイト整数)

$J_{\ell, \ell'}^x \neq 0$ かつ $K_{\ell, \ell'} = 0$ のとき 1 が与えられ, $K_{\ell, \ell'} \neq 0$ のとき 2 が与えられる. 即ち, MBASE(I, LBOND(p_{HH} , 2), 3) の値が与えられる.

CALL MLTOHHBX(I, KIS, NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, VD, VS, IDIM)

p_{HH} 番目の HH-対について $J_{\ell, \ell'}^x \neq 0$ または $K_{\ell, \ell'} \neq 0$ であり, かつ, 全系のスピン配列の I 番目のグループについて IFLGOELM(I, LBOND(p_{HH} , 2))=0 である場合に引用される.

[引数]

I, KIS, VD 以外は MLTDHH でのものと同じ.

I (入力; 4 バイト整数)

全系のスピン配列のグループの番号 I が与えられる.

KIS (入力; 4 バイト整数)

IPAIR (3.1 節 [3] を参照) で決められたルールに従う HH-対の番号 LBOND(p_{HH} , 2) が与えられる.

VD(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数)

I 番目のグループに属する全系のスピン配列の番号 J について, $\langle \Phi(J') | h_{\sigma}^{(i)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ ($\ell \in H, \ell' \in H$) に 0 でない値を与える J' を $J^{(i)}$ とする ($i=1, 2$). $J_{\ell, \ell'}^x \neq 0$ かつ $K_{\ell, \ell'} = 0$ のときには, 与えられた VD(J) に $\langle V_S | \Phi(J^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_{\sigma}^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が VD(J) に返され, また, 与えられた VD($J^{(1)}$) に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_{\sigma}^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が VD($J^{(1)}$) に返される. ただし, $J^{(1)}$ (即ち, $k_H^{(1)}$) が存在しない場合には, 何の処理も行われない. 一方, $K_{\ell, \ell'} \neq 0$ のときには, 与えられた VD(J) に $\langle V_S | \Phi(J^{(1)}) \rangle \langle \Phi(J^{(1)}) | h_{\sigma}^{(1)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle + \langle V_S | \Phi(J^{(2)}) \rangle \langle \Phi(J^{(2)}) | h_{\sigma}^{(2)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が VD(J) に返され, また, 与えられた VD($J^{(i)}$) に $\langle V_S | \Phi(J) \rangle \langle \Phi(J^{(i)}) | h_{\sigma}^{(i)}(\ell, \ell') | \Phi(J) \rangle$ を加えた値が VD($J^{(i)}$) に返される. ただし, $J^{(1)}$ (即ち, $k_H^{(1)}$) が存在しない場合には, $J^{(1)}$ に関する処理は行われず, $J^{(2)}$ (即ち, $k_H^{(2)}$) が存在しない場合には, $J^{(2)}$ に関する処理は行われない.

[1-3] Lanczös 法による 3 重対角化のための各ステップの実行

CALL MACRO2(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD,
MSGBC, DIAG, NDCLRD, VEC0, VEC1, IDIM, VEC, NDCLRV,
NVEC, LBOND, NBOND, LBASE, MBASE, IFLGDELM,
IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM, LK, ISW, PRDA)

VEC0, VEC1, LK およびコモンブロック (common block) /VECDAT/ 中の ALPHA(LK) (3 重対角行列の LK 番目の対角要素), BETA(LK) (3 重対角行列の LK 番目の副対角要素) の計算を行う。

[引数]

VEC0, VEC1, IDIM, VEC, LK, ISW, PRDA 以外は LNCZ2E でのものと同じ。

VEC0(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数), **VEC1(0:IDIM-1)** (入出力; 8 バイト実数)

1 つ前のステップで出力された $VEC0(J)$ および $VEC1(J)$ を J 成分とするベクトルを, それぞれ, V_0 および V_1 とする. 但し, 最初のステップでは, $V_0 = V_{\text{initial}}$, $V_1 = \sum_{J'} \langle V_{\text{initial}} | \Phi(J') \rangle \langle \Phi(J') | \mathcal{H}$ である. V_0 の J 成分 $\langle V_0 | \Phi(J) \rangle$ の値および V_1 の J 成分 $\langle V_1 | \Phi(J) \rangle$ の値が, それぞれ, $VEC0(J)$, $VEC1(J)$ に与えられる. V_0 と V_1 との内積を α とするとき, これが 3 重対角行列の LK 番目の対角要素 ALPHA(LK) であり, $V_1 - \alpha V_0$ のノルムを β とするとき, これが 3 重対角行列の LK 番目の副対角要素 BETA(LK) である. $\{\langle V_1 | \Phi(J) \rangle - \alpha \langle V_0 | \Phi(J) \rangle\} / \beta$ および $\sum_{J'} \langle (V_1 - \alpha V_0) / \beta | \Phi(J') \rangle \langle \Phi(J') | \mathcal{H} | \Phi(J) \rangle - \beta \langle V_0 | \Phi(J) \rangle$ の値が, それぞれ, $VEC0(J)$, $VEC1(J)$ に返される. 以上で $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

IDIM (入力; 4 バイト整数)

行列の次元. IBASE(NSB) の値が与えられる.

VEC(0:NDCLRV, 0:NVEC) (8 バイト実数)

ISW=0 のときには使用されない変数である.

LK (入出力; 4 バイト整数)

MACRO2 を実行する際のステップ数 (2 ステップ目以後では, これは 1 つ前のステップの終了時に出力された LK の値に等しい) が与えられ, それに 1 を加えた値が返される. 但し, $\beta = \text{BETA}(\text{LK})$ の値が 0.5×10^{-30} より小さい場合には, 与えられた LK にマイナスを付けた値が返される.

ISW (入力; 4 バイト整数)

0 が与えられる.

PRDA (作業領域; 4 バイト整数)

MACRO2 の下位ルーチンとして, INPRO, NORMER, SWAPPER, ADDER (以上 A.5 節を参照) および MLTPLY ([1-2] を参照) がある.

[1-4] ACOS および SX 用の版での、3 重対角行列の固有値の計算, Lanczös 法 の収束のチェックの実行, および、固有ベクトルの計算も行う場合には、その準備としての 3 重対角行列の固有ベクトルの計算.

CALL MALNCNEC(LLANCZ, LK, ALPHA, BETA, EE, E2P, COEF, NDCLRW,
NVEC, ERRLNCZ, IWK1, WK1, INDRET)

EE, COEF, INDRET, E2P の計算を行い, 合わせて Lanczös 法 の収束のチェックを行う. ただし, 固有ベクトルを計算するための準備としての COEF の計算は Lanczös 法 が収束し, かつ, $1 \leq NVEC \leq 4$ である場合のみに行う.

[引数]

NVEC は LNCZ2E でのものと同じ.

LLANCZ (入力; 4 バイト整数)

1 から 200 までの整数値が与えられる. $LLANCZ \geq 5$ の場合, LLANCZ の値は MALNCNEC を実行する際のチェックの回数に 4 を加えた値になっている.

LK (入力; 4 バイト整数)

MALNCNEC を引用する直前に実行された MACRO2 から出力された LK の値が与えられる. この値は MALNCNEC で対角化する 3 重対角行列の次元に 1 を加えた値に等しい.

ALPHA(NDCLRW) (入力; 8 バイト実数)

3 重対角行列の対角要素が ALPHA(i) ($i=1, 2, \dots, LK-1$) に与えられる.

BETA(NDCLRW) (入力; 8 バイト実数)

3 重対角行列の副対角要素が BETA(i) ($i=1, 2, \dots, LK-2$) に与えられる.

EE(NDCLRW) (出力; 8 バイト実数)

3 重対角行列の固有値が, 小さい順に 4 個, EE(1), EE(2), EE(3), EE(4) に返される.

E2P (入出力; 8 バイト実数)

1 つ前のチェックの終了時に出力された EE(2) の値が与えられ, 新たに計算された EE(2) の値が返される. ただし, 最初のチェックの際には, 十分大きな値 10^{50} が与えられる.

COEF(NDCLRW,5) (出力; 8 バイト実数)

Lanczös 法 が収束しかつ $1 \leq NVEC \leq 4$ の場合に, 固有値 EE(i) ($i=1, 2, 3, 4$) に対応する 3 重対角行列の固有ベクトルが COEF(1, i), COEF(2, i), \dots , COEF(LK* - 1, i) に返される. ここで, LK* は Lanczös 法 が収束した時点での LK の値であり, LK* - 1 は Lanczös 法 が収束した際に LNCZM から出力される ITR の値の 5 倍に等しい.

NDCLRW (入力; 4 バイト整数)

ALPHA, BETA, EE, COEF, IWK1, WK1 の整合寸法. $NDCLRW \geq 1000$ でなければならない.

ERRLNCZ (入力; 8 バイト実数)

Lanczös 法 の収束判定のための誤差の上限値が与えられる. $|E2P - E(2)| \leq |E(2)| \times \text{ERRLNCZ}$ または $|E2P - E(2)| \leq \text{ERRLNCZ}$ の条件が満たされたとき, 収束が完了したと見なされる.

IWK1(NDCLRW) (作業領域; 4 バイト整数)

WK1(NDCLRW,6) (作業領域; 8 バイト実数)

INDRET (出力; 4 バイト整数)

収束が完了したときに 1 が返され, 未完了であるときに 0 が返される. また, 下記のルーチン DCSTSN, DCSTSS が異常終了したときには -1 が返される.

MALNCNEC の下位ルーチンとして, 下記のルーチン DCSTSN, DCSTSS がある.

CALL DCSTSN(ALPHA, N, BETA, EPS, EE, M, ISW, WK1, IERR)

CALL DCSTSS(ALPHA, N, BETA, EPS, EE, M, COEF, LNV, ISW, IWK1, WK1, IERR)

DCSTSN は MALNCNEC での LLANCZ の値が 4 以上のときに引用されて, EE の計算を行う. DCSTSS は MALNCNEC での NVEC の値が 1 以上のときに Lanczös 法の収束完了後引用されて, COEF および EE の計算を行う. 前述の通り, DCSTSN, DCSTSS は科学技術計算ライブラリ ASL 中のサブルーチン副プログラムである. 以下での引数の説明は, 1.5 節に与えた DCSTSN, DCSTSS の説明を参照しながら読んでいただきたい.

[引数]

ALPHA, BETA, EE, COEF, IWK1, WK1 は MALNCNEC でのものと同じ.

N (入力; 4 バイト整数)

3 重対角行列の次元, 即ち, MALNCNEC での LK から 1 を引いた値が与えられる.

EPS (入力; 8 バイト実数)

-1.0^{-10} が与えられる.

M (入力; 4 バイト整数)

4 が与えられる.

LVN (入力; 4 バイト整数)

MALNCNEC での NDCLRW が与えられる.

ISW (入力; 4 バイト整数)

-1 が与えられる.

IERR (出力; 4 バイト整数)

正常終了の場合 0 が返される. 異常終了の場合に返される IERR の値の詳細については, 日本電気株式会社発行のマニュアル⁹⁾を参照されたい.

[1-5] SUN 用の版での、3重対角行列の固有値の計算、Lanczös 法の収束のチェックの実行、および、固有ベクトルの計算も行う場合には、その準備としての3重対角行列の固有ベクトルの計算。

CALL MALNCTIT(LLANCZ, LK, ALPHA, BETA, EE, E2P, COEF, NDCLRW,
NVEC, ERRLNCZ, IWK1, WK1, INDRET)

EE, COEF, INDRET, E2P の計算を行い、合わせて Lanczös 法の収束のチェックを行う。ただし、固有ベクトルを計算するための準備としての COEF の計算は Lanczös 法が収束し、かつ、 $1 \leq NVEC \leq 4$ である場合のみに行う。

[引数]

NVEC は LNCZ2E でのものと同じ。

LLANCZ (入力; 4 バイト整数)

1 から 200 までの整数値が与えられる。LLANCZ ≥ 5 の場合、LLANCZ の値は MALNCTIT を実行する際のチェックの回数に 4 を加えた値になっている。

LK (入力; 4 バイト整数)

MALNCTIT を引用する直前に実行された MACRO2 から出力された LK の値が与えられる。この値は MALNCTIT で対角化する 3 重対角行列の次元に 1 を加えた値に等しい。

ALPHA(NDCLRW) (入力; 8 バイト実数)

3 重対角行列の対角要素が ALPHA(i) (i=1, 2, ..., LK-1) に与えられる。

BETA(NDCLRW) (入力; 8 バイト実数)

3 重対角行列の副対角要素が BETA(i) (i=1, 2, ..., LK-2) に与えられる。

EE(NDCLRW) (出力; 8 バイト実数)

3 重対角行列の固有値が、小さい順に 4 個、EE(1), EE(2), EE(3), EE(4) に返される。

E2P (入出力; 8 バイト実数)

1 つ前のチェックの終了時に出力された EE(2) の値が与えられ、新たに計算された EE(2) の値が返される。ただし、最初のチェックの際には、十分大きな値 10^{50} が与えられる。

COEF(NDCLRW,5) (出力; 8 バイト実数)

Lanczös 法が収束しかつ $1 \leq NVEC \leq 4$ の場合に、固有値 EE(i) (i=1, 2, 3, 4) に対応する 3 重対角行列の固有ベクトルが COEF(1, i), COEF(2, i), ..., COEF(LK*-1, i) に返される。ここで、LK* は Lanczös 法が収束した時点での LK の値であり、LK*-1 は Lanczös 法が収束した際に LNCZM から出力される ITR の値の 5 倍に等しい。

NDCLRW (入力; 4 バイト整数)

ALPHA, BETA, EE, COEF, IWK1, WK1 の整合寸法。NDCLRW ≥ 1000 でなければならない。

ERRLNCZ (入力; 8 バイト実数)

Lanczös 法の収束判定のための誤差の上限値が与えられる。 $|E2P-E(2)| \leq |E(2)| \times \text{ERRLNCZ}$ または $|E2P-E(2)| \leq \text{ERRLNCZ}$ の条件が満たされたとき、収束が完了したと見なされる。

IWK1(NDCLRW) (作業領域; 4 バイト整数)

WK1(NDCLRW,6) (作業領域; 8 バイト実数)

INDRET (出力; 4 バイト整数)

収束が完了したときに 1 が返され, 未完了であるときに 0 が返される.

MALNCTIT の下位ルーチンとして, 下記のルーチン BISEC, VEC12 がある.

CALL BISEC(ALPHA, BETA, LK-1, EE, 4, EPS)

CALL VEC12(EE, LK-1, NVEC, WK1(1,1), WK1(1,2), WK1(1,3),
WK1(1,4), WK1(1,5), IWK1)

BISEC, VEC12 の 2 つのルーチンは TITPACK Version 2 でのものをそのまま使わせていただいている. それらの詳細については, TITPACK Version 2 の操作説明書³⁾を参照されたい.

A.2.4 LNCZMINV の下位ルーチン

LNCZMINV の下位ルーチンとして, PAIRCHK, VEC02, ADDER, VMOVE (以上 A.5 節を参照), VECINI (A.2.3 節 [1-1] を参照), MLTPLY (A.2.3 節 [1-2] を参照) の他に下記のルーチン MACRO2, INVERS2 がある.

[1] Lanczös 法による固有ベクトルの計算のための各ステップの実行

CALL MACRO2(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY, HFIELD,
MSGBC, DIAG, NDCLRD, VEC0, VEC1, IDIM, VEC, NDCLRV,
NVEC, LBOND, NBOND, LBASE, MBASE, IFLGDELM,
IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM, LK, ISW, PRDA)

VEC0, VEC1, LK および VEC の計算を行う. VEC の計算には, あらかじめ LNCZM を実行して求めてあるコモンブロック (common block) /VECDAT/ 中の COEF も用いる.

[引数]

VEC0, VEC1, IDIM, VEC, LK, ISW, PRDA 以外は LNCZMINV でのものと同じ.

VEC0(0:IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数), **VEC1(0:IDIM-1)** (入出力; 8 バイト実数)

1 つ前のステップで出力された $VEC0(J)$ および $VEC1(J)$ を J 成分とするベクトルを, それぞれ, V_0 および V_1 とする. 但し, 最初のステップでは, $V_0 = V_{\text{initial}}$, $V_1 = \sum_{J'} \langle V_{\text{initial}} | \Phi(J') \rangle \langle \Phi(J') | \mathcal{H}$ である. V_0 の J 成分 $\langle V_0 | \Phi(J) \rangle$ の値および V_1 の J 成分 $\langle V_1 | \Phi(J) \rangle$ の値が, それぞれ, $VEC0(J)$, $VEC1(J)$ に与えられ, $\{\langle V_1 | \Phi(J) \rangle - \alpha \langle V_0 | \Phi(J) \rangle\} / \beta$ および $\sum_{J'} \langle (V_1 - \alpha V_0) / \beta | \Phi(J') \rangle \langle \Phi(J') | \mathcal{H} | \Phi(J) \rangle - \beta \langle V_0 | \Phi(J) \rangle$ の値が, それぞれ, $VEC0(J)$, $VEC1(J)$ に返される. ここで, α は V_0 と V_1 との内積, β は $V_1 - \alpha V_0$ のノルムである. 以上で $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

IDIM (入力; 4 バイト整数)

行列の次元. IBASE(NSB) の値が与えられる.

VEC(0:NDCLRV, 0:NVEC) (入出力; 8 バイト実数)

1 つ前のステップで出力された $VEC(J, i)$ の値が $VEC(J, i)$ に与えられる. 但し, 最初のステップでは, $\langle V_{\text{initial}} | \Phi(J) \rangle \times \text{COEF}(1, i+1)$ の値が $VEC(J, i)$ に与えられる. 与えられた $VEC(J, i)$ に $VEC0(J) \times \text{COEF}(\text{LK}, i+1)$ を加えた値が $VEC(J, i)$ に返される. ここで, $VEC0(J)$ は MACRO2 から出力される $VEC0(J)$ の値である. ここでのステップは $5 \times \text{ITR}$ (ITR は LNCZMINV に与えられる ITR) 回行われる. これらのステップの実行がすべて終了した時点では, LNCZM で計算されたエネルギー固有値 $E(i)$ に対応する固有ベクトルの J 成分が $VEC(J, i)$ に返されることになる. 以上で $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1; i=0, 1, \dots, \text{NVEC}-1$.

LK (入出力; 4 バイト整数)

MACRO2 を実行する際のステップ数 (2 ステップ目以後では, これは 1 つ前のステップの終了時に出力された LK の値に等しい) が与えられ, それに 1 を加えた値が返される.

ISW (入力; 4 バイト整数)

1 が与えられる.

PRDA (作業領域; 4 バイト整数)

MACRO2 の下位ルーチンとして, INPRO, NORMER, SWAPPER, ADDER (以上 A.5 節を参照) および MLTPLY (A.2.3 節 [1-2] を参照) がある.

[2] Lanczös 法 と CG 法とを組み合わせた逆反復法による固有ベクトルの計算

CALL INVERS2(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,
ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY,
HFIELD, MSGBC, DIAG, NDCLRD, VEC, NDCLRV,
MDCLRV, LBOND, NBOND, LBASE, MBASE,
IFLGDELM, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM, NVEC, ALAMBDA, IDS)

MDCLRV \geq NVEC+2 のときに引用されて, VEC($J, i-1$) の計算を行う.

[引数]

VEC, ALAMBDA, IDS 以外は LNCZMINV でのものと同じ.

VEC(0:NDCLRV, 0:MDCLRV) (入出力および作業領域; 8 バイト実数)

ALAMBDA に与えられるエネルギー固有値 $E(i)$ に対応する, Lanczös 法によって計算された固有ベクトルの J 成分が VEC($J, i-1$) に与えられ, この固有値に対応する, Lanczös 法 と CG 法とを組み合わせた逆反復法によって計算された固有ベクトルの J 成分が VEC($J, i-1$) に返される. 但し, 逆反復法が 1 5 回以内で精度 0.5×10^{-11} 以内に収束しなかった場合には, 近似的な固有ベクトルの J 成分が VEC($J, i-1$) に返される. なお, VEC($J, NVEC$), VEC($J, NVEC+1$), VEC($J, NVEC+2$) は作業領域として使用される. 以上で, $J=0, 1, \dots, IDIM-1$; $IDIM=IBASE(NSB)$.

ALAMBDA (入力; 4 バイト整数)

i 番目のエネルギー固有値 $E(i)$ が与えられる. ここで, $1 \leq i \leq NVEC$ でなければならない. INVERS2 では, このエネルギー固有値に対応する固有ベクトルが計算される.

IDS(0:3) (入力; 4 バイト整数)

$i-1$ が IDS(0) に与えられる. ここで, i は ALAMBDA に与えられるエネルギー固有値 $E(i)$ の番号である. また, NVEC, NVEC+1, NVEC+2 が, それぞれ, IDS(1), IDS(2), IDS(3) に与えられる.

INVERS2 の下位ルーチンとして, VMOVE, INPRO, DIVER, VEC01, ADDER (以上 A.5 節を参照) および MLTPLY (A.2.3 節 [1-2] を参照) の他に下記のルーチン CGMETH2 がある.

[2-1] 逆反復法のステップとしての CG 法の実行

```
CALL CGMETH2(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1,  
            ISTAT2, IPAIR, AJX, AJZ, ABIQD, IBOND, ANISTRPY,  
            HFIELD, MSGBC, DIAG, NDCLRD, VEC, NDCLRV,  
            MDCLRV, LBOND, NBOND, LBASE, MBASE,  
            IFLGDELM, IFLGOELM, ELMNT, LOC, NDCLRM, NVEC, ALAMBDA, IDS)
```

VEC(J , IDS(0)) の計算を行う。

[引数]

VEC 以外は INVERS2 でのものと同じ。

VEC(0:NDCLRV, 0:MDCLRV) (入出力および作業領域; 8 バイト実数)

逆反復法の最初のステップでは, ALAMBDA に与えられるエネルギー固有値 $E(i)$ に対応する, Lanczös 法によって計算された固有ベクトルの J 成分が, また, 2 ステップ目以後では, 1 つ前のステップで CGMETH2 から出力された VEC(J , IDS(0)) が, VEC(J , IDS(1)) に与えられる. 連立 1 次方程式 $\sum_{J'=0}^{\text{IDIM}-1} \{ \langle \Phi(J) | \mathcal{H} | \Phi(J') \rangle - \text{ALAMBDA} \times \delta(J, J') \} \times X(J') = \text{VEC}(J, \text{IDS}(1))$ (ここで, $\delta(\dots, \dots)$ は Kronecker delta を示す) をある精度の範囲で解いた結果 $X(0), X(1), \dots, X(\text{IDIM}-1)$ が, それぞれ, VEC(0, IDS(0)), VEC(1, IDS(0)), \dots , VEC(IDIM-1, IDS(0)) に返される. なお, VEC(J , IDS(2)), VEC(J , IDS(3)) は作業領域として使用される. 以上で, $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$; IDIM=IBASE(NSB).

CGMETH2 の下位ルーチンとして, INPRO, VMOVE, VEC01, ADDER (以上 A.5 節を参照) および MLTPY (A.2.3 節 [1-2] を参照) がある.

A.2.5 CHECKM の下位ルーチン

CHECKM の下位ルーチンとして, INPRO, VEC01 (以上 A.5 節を参照) および MLTPLY (A.2.3 節 [1-2] を参照) がある.

A.3 物理量計算用ルーチンの下位ルーチン

A.3.1 CRFNST1 の下位ルーチン

CRFNST1 の下位ルーチンとして, AVRGSI (3.3 節 [4] を参照), AVRGSIJ (3.3 節 [9] を参照), AVRGTI (3.3 節 [5] を参照), AVRGTITJ (3.3 節 [10] を参照) がある.

A.3.2 CRFNS1 の下位ルーチン

CRFNS1 の下位ルーチンとして, AVRGSI (3.3 節 [4] を参照), AVRGSIJ (3.3 節 [9] を参照) がある.

A.3.3 CRFNT1 の下位ルーチン

CRFNT1 の下位ルーチンとして, AVRGTI (3.3 節 [5] を参照), AVRGTITJ (3.3 節 [10] を参照) がある.

A.3.4 AVRGTI の下位ルーチン

AVRGTI の下位ルーチンとして, CLSBND (A.2.2 節 [1] を参照), ELMO (A.2.2 節 [3] を参照), MLTO (A.2.3 節 [1-2-2] を参照), VEC01, INPRO (以上 A.5 節を参照) がある.

A.3.5 CRFNST2 の下位ルーチン

CRFNST2 の下位ルーチンとして, AVRGSIJ (3.3 節 [9] を参照), AVRGTITJ (3.3 節 [10] を参照) がある.

A.3.6 CRFNS2 の下位ルーチン

CRFNS2 の下位ルーチンとして, AVRGSIJ (3.3 節 [9] を参照) がある.

A.3.7 CRFNT2 の下位ルーチン

CRFNT2 の下位ルーチンとして, AVRGTITJ (3.3 節 [10] を参照) がある.

A.3.8 AVRGSISJ の下位ルーチン

AVRGSISJ の下位ルーチンとして, CLSBND (A.2.2 節 [1] を参照), ELMO (A.2.2 節 [3] を参照), MLTO (A.2.3 節 [1-2-2] を参照), VEC01, INPRO (以上 A.5 節を参照) がある.

A.3.9 AVRGTITJ の下位ルーチン

AVRGTITJ の下位ルーチンとして, CLSBND (A.2.2 節 [1] を参照), ELMO (A.2.2 節 [3] を参照), MLTO (A.2.3 節 [1-2-2] を参照), VEC01, INPRO (以上 A.5 節を参照) がある.

A.4 ユーザが用いるその他の副プログラムの下位ルーチン

A.4.1 FIND0 の下位ルーチン

FIND0 の下位ルーチンとして下記のルーチン FINDHL がある.

[1] 部分系 L, H でのスピン配列を与えることによって決められる全系のスピン配列の番号の計算

```
CALL FINDHL(NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT,  
            ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2, ISTH, ISTL, ISTN)
```

ISTN の計算を行う。以下での引数の説明は、2.1 節の議論を参照しながら読んでいただきたい。

[引数]

NS, NSLMAX, NSB, NH, NL, IBASE, NSTAT, ISTAT1, NDCLR1, ISTAT2 は FIND0 でのものと同じ。

ISTH (入力; 4 バイト整数)

部分系 H でのスピン配列の 1 0 進法での値 I_H ($0 \leq I_H \leq 3^{NS-NSLMAX}-1$) が与えられる。

ISTL (入力; 4 バイト整数)

部分系 L でのスピン配列の 1 0 進法での値 I_L ($0 \leq I_L \leq 3^{NSLMAX}-1$) が与えられる。

ISTN (出力; 4 バイト整数)

I_H, I_L を与えることによって決められる全系のスピン配列の番号 J が返される。

[使用上の注意]

ユーザが FINDHL を直接メインルーチンから引用する場合には、あらかじめ ITSZ に (ISTH を 3 進法表示したときの各桁の数値の和)+(ISTL を 3 進法表示したときの各桁の数値の和) の値を与えて CRESZ を実行しておかなくてはならない。

FINDHL の下位ルーチンとして、ITOTBZ (A.5 節を参照) がある。

A.4.2 CHKWV の下位ルーチン

CHKWV の下位ルーチンとして、ITOTBZ (A.5 節を参照) がある。

A.5 多くのルーチンに共通な下位ルーチン

[1] IPAIR, IBOND, NS に与えられたデータが満たすべき条件のチェック

CALL PAIRCHK(IPAIR, IBOND, NS)

$1 \leq \text{IPAIR}(i) \leq \text{NS}$ ($i=1, 2, \dots, 2 \cdot \text{IBOND}$) の条件が正しく満たされているかどうかのチェックを行う。この条件が満たされていない場合にはエラーメッセージ E04 (§4 を参照) が出力される。

[引数]

IPAIR(**IBOND***2) (入力; 4 バイト整数)

IBOND 個のサイト対 (IBOND の項を参照) の両端のサイトの番号が, 1 から NS までの整数の IBOND*2 個の組として IPAIR(1) から IPAIR(IBOND*2) までに与えられる。

IBOND (入力; 4 バイト整数)

$J_{\ell, \ell'}^x, J_{\ell, \ell'}^z, K_{\ell, \ell'}$ のうち少なくとも1つが0でないサイト対 $\langle \ell, \ell' \rangle$ の総数が与えられる。

NS (入力; 4 バイト整数)

全スピン数が与えられる。 $2 \leq \text{NS} \leq 24$ を満たさなければならない。

[2] NS, NSLMAX, ITSZ に与えられたデータが満たすべき条件のチェック

CALL PRMCHK(NS, NSLMAX, ITSZ)

$2 \leq \text{NS} \leq 24, |\text{ITSZ}| \leq \text{NS}, [(\text{NS}+1)/2] \leq \text{NSLMAX} \leq \text{NS}$ ($[\dots]$ はガウス記号) の条件が正しく満たされているかどうかのチェックを行う。第1, 第2, 第3の条件が満たされていない場合には, それぞれ, エラーメッセージ E05, E06, E07 (§4 を参照) が出力される。

[引数]

NS (入力; 4 バイト整数)

全スピン数が与えられる。 $2 \leq \text{NS} \leq 24$ を満たさなければならない。

NSLMAX (入力; 4 バイト整数)

部分系 L に属するサイト数が与えられる。 $[(\text{NS}+1)/2] \leq \text{NSLMAX} \leq \text{Min}(\text{NS}, 12)$ を満たさなければならない。

ITSZ (入力; 4 バイト整数)

S_{total}^z の固有値 m_{total} . $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \text{NS}$ のうちのいずれかの値が与えられる。

[3] 1 0 進法表示での整数値を 3 進法表示したときの各桁の数値の和の計算

ITC=ITOTBZ(I)

$0 \leq I \leq 3^{12} - 1$ を満たす任意の整数値 I を与え, それを 3 進法表示したときの各桁の数値の和 ITC を計算する. なお, ITOTBZ の型は 4 バイト整数である.

[引数]

I (入力; 4 バイト整数)

$0 \leq I \leq 3^{12} - 1$ を満たす任意の整数値が与えられる.

[4] ベクトルの内積の計算

CALL INPRO(IDIM, V1, V0, PROD)

[引数]

IDIM (入力; 4 バイト整数)

ベクトル $V1, V0$ の次元が与えられる.

V1(0: IDIM-1) (入力; 8 バイト実数)

あるベクトル $V1$ の J 成分が $V1(J)$ に与えられる. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

V0(0: IDIM-1) (入力; 8 バイト実数)

あるベクトル $V0$ の J 成分が $V0(J)$ に与えられる. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

PROD (出力; 8 バイト実数)

ベクトル $V1, V0$ の内積 $\sum_{J=0}^{\text{IDIM}-1} V1(J) \times V0(J)$ の値が PROD に返される.

[5] 2 つのベクトルの線型結合の計算

CALL ADDER(IDIM, VD, VS1, VS2, A1, A2)

[引数]

IDIM (入力; 4 バイト整数)

ベクトル $VD, VS1, VS2$ の次元が与えられる.

VD(0: IDIM-1) (出力; 8 バイト実数)

$A1 \times VS1(J) + A2 \times VS2(J)$ の値が $VD(J)$ に返される. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

VS1(0: IDIM-1) (入力; 8 バイト実数)

あるベクトル $VS1$ の J 成分が $VS1(J)$ に与えられる. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

VS2(0: IDIM-1) (入力; 8 バイト実数)

あるベクトル $VS2$ の J 成分が $VS2(J)$ に与えられる. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

A1 (入力; 8 バイト実数)

ある実数値が与えられる.

A2 (入力; 8 バイト実数)

ある実数値が与えられる.

[6] ベクトルの実数値による割算

CALL DIVER(IDIM, VD, VS, D)

[引数]

IDIM (入力; 4 バイト整数)

ベクトル VD, VS の次元が与えられる.

VD(0: IDIM-1) (出力; 8 バイト実数)

VS(J)/D の値が VD(J) に返される. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

VS(0: IDIM-1) (入力; 8 バイト実数)

あるベクトル VS の J 成分が VS(J) に与えられる. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

D (入力; 8 バイト実数)

ある 0 に等しくない実数値が与えられる.

[7] ベクトルのゼロクリア

CALL VEC01(IDIM, V)

[引数]

IDIM (入力; 4 バイト整数)

ベクトル V の次元が与えられる.

V(0: IDIM-1) (出力; 8 バイト実数)

0 が V(J) に返される. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

[8] 2つのベクトルのゼロクリア

CALL VEC02(IDIM, V1, V2)

[引数]

IDIM (入力; 4 バイト整数)

ベクトル V1, V2 の次元が与えられる.

V1(0: IDIM-1) (出力; 8 バイト実数)

0 が V1(J) に返される. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

V2(0: IDIM-1) (出力; 8 バイト実数)

0 が V2(J) に返される. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

[9] 2つのベクトルの線型結合のノルムの計算

CALL NORMER(IDIM, PROD, V1, V2, A1, A2)

[引数]

IDIM (入力; 4 バイト整数)

ベクトル V1, V2 の次元が与えられる.

PROD (出力; 8 バイト実数)

$\sqrt{\sum_{J=0}^{\text{IDIM}-1} \{A1 \times V1(J) + A2 \times V2(J)\}^2}$ の値が PROD に返される.

V1(0: IDIM-1) (入力; 8 バイト実数)

あるベクトル V1 の J 成分が V1(J) に与えられる. ここで J=0, 1, ..., IDIM-1.

V2(0: IDIM-1) (入力; 8 バイト実数)

あるベクトル V2 の J 成分が V2(J) に与えられる. ここで J=0, 1, ..., IDIM-1.

A1 (入力; 8 バイト実数)

ある実数値が与えられる.

A2 (入力; 8 バイト実数)

ある実数値が与えられる.

[10] 2つのベクトルとそれらから作られる2種類の線型結合との入れ換え

CALL SWAPPER(IDIM, V1, V2, A11, A12, A21, A22)

[引数]

IDIM (入力; 4 バイト整数)

ベクトル V1, V2 の次元が与えられる.

V1(0: IDIM-1) (入出力; 8 バイト実数), **V2(0: IDIM-1)** (入出力; 8 バイト実数)

あるベクトル V1, V2 の J 成分が, それぞれ, V1(J), V2(J) に与えれ, A11×V1(J)+A12×V2(J), A21×V1(J)+A22×V2(J) の値が, それぞれ, V1(J), V2(J) に返される. ここで J=0, 1, ..., IDIM-1.

A11 (入力; 8 バイト実数)

ある実数値が与えられる.

A12 (入力; 8 バイト実数)

ある実数値が与えられる.

A21 (入力; 8 バイト実数)

ある実数値が与えられる.

A22 (入力; 8 バイト実数)

ある実数値が与えられる.

[11] ベクトルの複写

CALL VMOVE(IDIM, VD, VS)

[引数]

IDIM (入力; 4 バイト整数)

ベクトル VD, VS の次元が与えられる.

VD(0: IDIM-1) (出力; 8 バイト実数)

VS(J) が VD(J) に返される. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.

VS(0: IDIM-1) (入力; 8 バイト実数)

あるベクトル VS の J 成分が VS(J) に与えられる. ここで $J=0, 1, \dots, \text{IDIM}-1$.